



Echanges de masse et de chaleur entre deux phases liquides stratifiées dans un écoulement à bulles

Céline Lapuerta

► To cite this version:

Céline Lapuerta. Echanges de masse et de chaleur entre deux phases liquides stratifiées dans un écoulement à bulles. Mathématiques [math]. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2006. Français. NNT : . tel-00132564v2

HAL Id: tel-00132564

<https://theses.hal.science/tel-00132564v2>

Submitted on 19 Mar 2007

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ AIX-MARSEILLE I - PROVENCE
U.F.R. de Mathématiques, Informatique et Mécanique

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ AIX-MARSEILLE I

Discipline : Mathématiques Appliquées
École Doctorale Mathématiques et Informatique de Marseille
E.D. numéro 184

présentée
par

Céline LAPUERTA

le 5 octobre 2006

**Echanges de masse et de chaleur entre deux phases
liquides stratifiées dans un écoulement à bulles**

JURY

M	P.	ANGOT	LATP, Aix-Marseille I	Directeur de thèse
Mme	S.	BENZONI-GAVAGE	ICJ, Lyon I	Examineur
M	F.	BOYER	CNRS-LATP, Aix-Marseille I	Directeur de thèse
M	H.	GUILLARD	INRIA, Sophia Antipolis	Rapporteur
M	A.	MIRANVILLE	LMA, Université de Poitiers	Rapporteur
M	B.	PIAR	IRSN, Cadarache	Encadrant
M	J.-C.	LATCHÉ	IRSN, Cadarache	Membre invité

Remerciements

Mes premiers remerciements s'adressent à Bruno Piar et Franck Boyer, qui ont permis grâce à leur aide et leur disponibilité l'aboutissement de ce travail.

Je remercie Bruno pour avoir été mon "tuteur" pendant toutes ces années et pour la confiance qu'il m'a témoignée en me proposant ce sujet. Ses conseils, sa pédagogie et sa rigueur m'ont permis de progresser continuellement. Il a toujours été présent et son soutien a été déterminant dans l'accomplissement de la thèse.

Un grand merci à Franck d'avoir accepté de diriger cette thèse. Sa constante disponibilité, ses conseils et son expérience sur ce sujet m'ont permis de mener à bien ce travail. Il a toujours pris le temps nécessaire pour répondre à mes nombreuses questions.

Que tous les deux trouvent ici le témoignage de ma profonde reconnaissance.

Je souhaite remercier Philippe Angot, co-directeur de cette thèse, pour la confiance qu'il m'a témoignée tout au long du doctorat. Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Michel Quintard pour son aide précieuse. Ses remarques ont permis de faire avancer ce travail en particulier l'étude sur les transferts thermiques.

Je tiens à remercier Alain Miranville et Hervé Guillard d'avoir rapporté le manuscrit et pour l'attention qu'ils ont porté à ce travail. Merci à Sylvie Benzoni-Gavage d'avoir accepté d'être présidente du jury.

Je suis très reconnaissante envers Jean-Claude Latché de m'avoir accueillie dans son laboratoire. Je le remercie pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail et pour le temps qu'il a pris pour m'aider malgré ses nombreuses sollicitations.

Un grand merci à tous les membres du laboratoire pour leur disponibilité et leur bonne humeur. Ils ont permis que la thèse se déroule dans un environnement très agréable et enrichissant. Un clin d'œil particulier à Jean-Paul, Fabien et Marc pour leurs conseils, leur aide et leur soutien dans les moments difficiles... mais aussi pour leurs vives discussions de foot, leurs blagues et leur enthousiasme permanent. Je tiens à remercier plus particulièrement Marc qui m'a supportée dans son bureau. Sa gentillesse et son écoute ont été très importantes pour moi.

Je souhaite saluer ici les thésards "anciens" et "nouveaux" pour leur aide, leur encouragement et pour tous les bons moments passés ensemble : Isabelle, Florence, Laura, Fred, Patrick, Matthieu, Christian, Pierre-Guy, Vincent, Aurélien et Guillaume ainsi que Michaël Thereau, stagiaire, qui a participé à ce travail.

Enfin, je tiens à remercier mes amis et ma famille pour leur soutien et leur encouragement et plus particulièrement mes parents et ma sœur qui ont toujours été là pour moi. Une pensée particulière pour Jean-François qui m'a soutenue et supportée pendant toutes ces années et qui a fait preuve d'une grande patience.

Table des matières

Introduction	11
I Modèle de Cahn-Hilliard triphasique	21
I.1 Modèle de Cahn-Hilliard diphasique	22
I.2 Modèle de Cahn-Hilliard pour un mélange à trois constituants	24
I.2.1 Etablissement du modèle	24
I.2.2 Coercivité des termes capillaires	26
I.2.3 Existence et unicité des solutions faibles	28
I.3 Modèle triphasique algébriquement et dynamiquement consistant	30
I.3.1 Modèle algébriquement consistant	30
I.3.2 Premiers exemples pour le potentiel de Cahn-Hilliard	33
I.3.3 Modèle consistant et non-consistant	34
I.3.4 Potentiel de Cahn-Hilliard F d'ordre plus élevé	38
I.3.5 Consistance dynamique du modèle	46
I.4 Modèle couplé de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes	51
II Théorèmes d'existence et de stabilité	55
II.1 Théorème d'existence et d'unicité des solutions faibles	56
II.2 Théorème d'existence et d'unicité des solutions fortes	66
II.3 Stabilité asymptotique des états métastables	74
III Schémas numériques et propriétés du modèle discret	81
III.1 Discrétisation du problème de Cahn-Hilliard et estimation d'énergie	83
III.1.1 Discrétisation en temps	83
III.1.2 Discrétisation en espace	84
III.1.3 Estimation d'énergie pour $F = F_0$	86
III.1.4 Estimation d'énergie pour $F = F_{\Lambda,0}$	94
III.1.5 Passage d'une bulle d'air à travers une interface eau/huile	96
III.2 Discrétisation du modèle couplé (III.1)-(III.5)	99
III.2.1 Discrétisation en temps	99
III.2.2 Discrétisation spatiale	99
III.3 Résolution numérique du problème discret	106
III.3.1 Equations de Cahn-Hilliard	106
III.3.2 Equations de Navier-Stokes	108
III.4 Influence de quelques paramètres	114
III.4.1 Régularisation des paramètres physiques	114
III.4.2 Influence de la mobilité	115
III.4.3 Epaisseur d'interface et pas de maillage	117

IV Applications numériques	119
IV.1 Montée d'une bulle dans un liquide	120
IV.1.1 Régimes "Dimpled", "Ellipsoidal" et "Skirted"	122
IV.1.2 Régime "Spherical cap"	128
IV.2 Lentille piégée entre deux phases stratifiées	131
IV.2.1 Etalement partiel	131
IV.2.2 Etalement total	134
IV.3 Comportement d'une bulle dans un bain stratifié	135
IV.3.1 Pénétration de la bulle dans la phase légère	136
IV.3.2 Entraînement de la phase lourde dans la phase légère	138
IV.3.3 Quantité de fluide lourd entraîné	139
IV.4 Transferts de chaleur	143
IV.4.1 Passage d'une bulle à travers une interface liquide/liquide	145
IV.4.2 Passage d'un train de bulles à travers une interface liquide/liquide	148
IV.5 Limites : interaction corium/béton	152
Conclusion	157
A Modèle de Cahn-Hilliard diphasique	161
A.1 Equation d'évolution du paramètre d'ordre	161
A.2 Solution à l'équilibre d'une interface plane en dimension 1	163
B Quelques résultats mathématiques	167
B.1 Preuves des lemmes I.3.11, I.3.13 et I.3.16	167
B.2 Rappels d'analyse fonctionnelle	169
C Relations de sauts aux interfaces	173
D Angles de contact et triangle de Neumann	177
E Critères pour l'ascension d'une bulle dans un bain stratifié	181
F Paramètres physiques et numériques des simulations présentées	185
F.1 Paramètres des résultats du Chapitre 1	186
F.2 Paramètres des résultats du Chapitre 3	190
F.3 Paramètres des résultats du Chapitre 4	196
Bibliographie	207

Nomenclature

Général

d	dimension de l'espace
Ω	ouvert borné, connexe de \mathbb{R}^d , de frontière régulière
Γ	frontière de Ω
$m(f)$	moyenne de f sur le domaine, définie par $m(f) = \frac{1}{ \Omega } \int_{\Omega} f \, dx$
n	vecteur normal
t	vecteur ou plan tangentiel
κ	courbure $[\text{m}^{-1}]$

Paramètres physiques

c_p	chaleur massique	$[\text{J.kg}^{-1}\text{K}^{-1}]$
λ	conductivité thermique	$[\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
ϱ	masse volumique	$[\text{kg.m}^{-3}]$
η	viscosité	$[\text{Pa.s}]$
σ	tension de surface	$[\text{N.m}^{-1}]$
S_i	paramètre d'étalement de la phase i	$[\text{N.m}^{-1}]$

Modèle de Cahn-Hilliard

c	paramètre d'ordre	
\mathbf{c}	vecteur composé de trois paramètres d'ordre	
$\mathcal{F}_{\sigma,\varepsilon}^{\text{diph}}$	énergie libre de Cahn-Hilliard diphasique	$[\text{J}]$
$\mathcal{F}_{\Sigma,\varepsilon}^{\text{triph}}$	énergie libre de Cahn-Hilliard triphasique	$[\text{J}]$
F	potentiel de Cahn-Hilliard	
M_0	mobilité	
\mathcal{S}	hyperplan défini par $\mathcal{S} = \left\{ (c_1, c_2, c_3) \in \mathbb{R}^3, \quad c_1 + c_2 + c_3 = 1 \right\}$	
$\mathcal{S}_{\sigma_{ij}}^{\text{diph}}$	système diphasique	
ε	épaisseur d'interface	$[\text{m}]$
μ	potentiel chimique	
$\boldsymbol{\mu}$	vecteur composé de trois potentiels chimiques	
Σ_i	coefficient de capillarité $\Sigma_i = \sigma_{ij} + \sigma_{ik} - \sigma_{jk}$	$[\text{N.m}^{-1}]$
$\boldsymbol{\Sigma}$	vecteur composé de trois coefficients Σ_i	$[\text{N.m}^{-1}]$
Σ_T	coefficient défini par $\frac{3}{\Sigma_T} = \frac{1}{\Sigma_1} + \frac{1}{\Sigma_2} + \frac{1}{\Sigma_3}$	$[\text{N.m}^{-1}]$

Différents potentiels de Cahn-Hilliard

$$\tilde{F}_0 \quad \text{défini par } \tilde{F}_0(\mathbf{c}) = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2$$

$$F_0 \quad \text{défini par } F_0(\mathbf{c}) = \frac{\Sigma_1}{2}c_1^2(c_2 + c_3)^2 + \frac{\Sigma_2}{2}c_2^2(c_1 + c_3)^2 + \frac{\Sigma_3}{2}c_3^2(c_1 + c_2)^2$$

$$F_{\Lambda,\alpha} \quad \text{défini par } F_{\Lambda,\alpha}(\mathbf{c}) = F_0(\mathbf{c}) + \Lambda c_1^2c_2^2c_3^2(\varphi_\alpha(c_1) + \varphi_\alpha(c_2) + \varphi_\alpha(c_3))$$

$$F_{\Lambda,0} \quad \text{défini par } F_{\Lambda,0}(\mathbf{c}) = F_0(\mathbf{c}) + 3\Lambda c_1^2c_2^2c_3^2$$

Fonctions utilisées

$$f_i^F \quad \text{défini par } f_i^F(\mathbf{c}) = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c})) \right)$$

$$P \quad \text{défini par } P(\mathbf{c}) = 3\Lambda c_1^2c_2^2c_3^2$$

$$\varphi_\alpha \quad \text{défini par } \varphi_\alpha(c) = \frac{1}{(1 + c^2)^\alpha}$$

Formulation variationnelle, discrétisation éléments finis

\mathcal{V}_D^c	espace fonctionnel des paramètres d'ordre avec des conditions de Dirichlet non homogènes au bord
\mathcal{V}^c	espace fonctionnel des paramètres d'ordre avec des conditions de Dirichlet homogènes au bord
\mathcal{V}^μ	espace fonctionnel des potentiels chimiques
\mathcal{V}_h^c	espace d'approximation de \mathcal{V}^c
\mathcal{V}_h^μ	espace d'approximation de \mathcal{V}^μ
\mathbf{C}	vecteur des composantes de c dans la base \mathcal{V}_h^c
\mathbf{M}	vecteur des composantes de μ dans la base \mathcal{V}_h^μ

Bilans de masse, de quantité de mouvement et d'énergie

f_{ca}	force capillaire	[N]
g	accélération de la pesanteur	[m.s ⁻²]
p	pression	[Pa]
T	température	[K]
u	vitesse	[m.s ⁻¹]
ϕ_T	flux thermique	[W]
τ	tenseur de contrainte	
D	tenseur des taux de déformations	

Formulation variationnelle, discrétisation éléments finis

Q	espace fonctionnel de la pression
Q_h	espace d'approximation de Q

\mathcal{T}_D	espace fonctionnel de la température avec des conditions de Dirichlet non-homogènes au bord
\mathcal{T}	espace fonctionnel de la température avec des conditions de Dirichlet homogènes au bord
\mathcal{T}_h	espace d'approximation de \mathcal{T}
U	espace fonctionnel de la vitesse avec des conditions de Dirichlet non-homogènes au bord
X	espace fonctionnel de la vitesse avec des conditions de Dirichlet homogènes au bord
X_h	espace d'approximation de X

Résolution numérique

AL	méthode de Lagrangien Augmenté
PP	méthode de pénalité-projection
IP	méthode de projection incrémentale
r	paramètre d'augmentation dans les méthodes AL et PP
ρ	paramètre de descente dans la méthode AL

Référence à la bulle

d_b	diamètre de la bulle	[m]
r_b	rayon de la bulle	[m]
u_T	vitesse terminale	[m.s ⁻¹]

Indices

b	référence à la bulle
ℓ	référence au liquide

Nombres adimensionnels

nombre capillaire	$\mathbf{Ca} = \frac{\eta_\ell u_T}{\sigma}$
nombre d'Eötvös	$\mathbf{Eo} = \frac{g(\varrho_\ell - \varrho_b)d_b^2}{\sigma}$
nombre de Laplace	$\mathbf{La} = \frac{\sigma \varrho_\ell d_b}{\eta_\ell}$
nombre de Morton	$\mathbf{M} = \frac{g \eta_\ell^4 (\varrho_\ell - \varrho_b)}{\varrho_\ell^2 \sigma^3}$
nombre de Reynolds	$\mathbf{Re} = \frac{\varrho_\ell d_b u_T}{\eta_\ell}$
nombre de Weber	$\mathbf{We} = \frac{u_T^2 \varrho_\ell d_b}{\sigma}$

Certaines notations sont volontairement redondantes pour conserver des notations classiques, le contexte ne prêtant généralement pas à confusion. Dans le cas contraire, la notation utilisée est précisée dans le texte.

Introduction

L’Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) réalise des recherches, des expertises et des travaux dans les domaines de la sûreté nucléaire, de la protection contre les rayonnements ionisants, du contrôle et de la protection des matières nucléaires et de la protection contre les actes de malveillance.

Une part essentielle de l’analyse de sûreté est constituée par l’étude des différentes situations auxquelles un réacteur nucléaire peut se trouver confronté depuis les conditions normales de fonctionnement jusqu’aux accidents graves qui sont le cadre général de cette thèse.

Nous présentons ici le contexte et les objectifs de la thèse. Ensuite, nous expliquons les choix de modélisation qui ont été faits. Enfin, une description de l’étude est donnée.

Contexte : corium hors-cuve

Une situation d’accident grave éventuel est la perte de réfrigérant dans un réacteur à eau pressurisée (REP) entraînant un échauffement du cœur qui peut conduire à la rupture de la cuve qui l’entoure (figure 1). Suite à cette rupture, le cœur fondu, appelé *corium*, se déverse alors dans le puits de cuve composé de béton. Le corium, encore chauffé par le dégagement de puissance résiduelle dû à la désintégration des produits de fission, interagit alors avec les structures en béton qui le contiennent, et le bain ablate peu à peu les parois du puits de cuve. Cette interaction s’accompagne de relâchements importants de gaz : vaporisation de l’eau contenue dans le béton et formation de dioxyde de carbone par décomposition du calcaire, principalement. Le bain est alors traversé par un flux de bulles. Cette étape de l’accident est appelée *interaction corium-béton*. Le puits de cuve est une des barrières de confinement du corium, il est donc primordial de connaître la vitesse et la direction (horizontale ou verticale) de l’ablation du béton.

Le corium liquide est un mélange complexe, qui peut être constitué de plusieurs phases. Il est communément admis que l’on peut supposer une séparation en deux phases principales, l’une majoritairement *oxyde* et l’autre majoritairement *métallique*, de masses volumiques différentes. Nous nous intéressons plus particulièrement à un scénario probable de l’accident où le bain atteint une configuration stratifiée (dès que l’agitation engendrée par le flux gazeux tombe en deçà d’un certain seuil) et la phase métallique est plus lourde que la phase oxyde (figure 2). Ce phénomène a un impact majeur sur le déroulement de l’accident : la couche métallique, beaucoup plus conductrice, constitue un pont thermique entre la couche oxyde, dans laquelle est générée l’essentiel de la puissance, et les parois ; la progression de la cavité en est fortement affectée ainsi que, en conséquence, les modes et temps de percée du puits de cuve (percée latérale ou verticale).

De plus, le flux gazeux influence grandement les transferts entre les deux phases (modification des couches limites thermiques, changements topologiques de l’interface oxyde/métal avec entraînement éventuel du métal) pouvant accélérer l’ablation du béton dans une direction (horizontale ou verticale). La quantification de ces échanges reste un problème ouvert préjudiciable à la fiabilité des simulations d’accident actuelles.

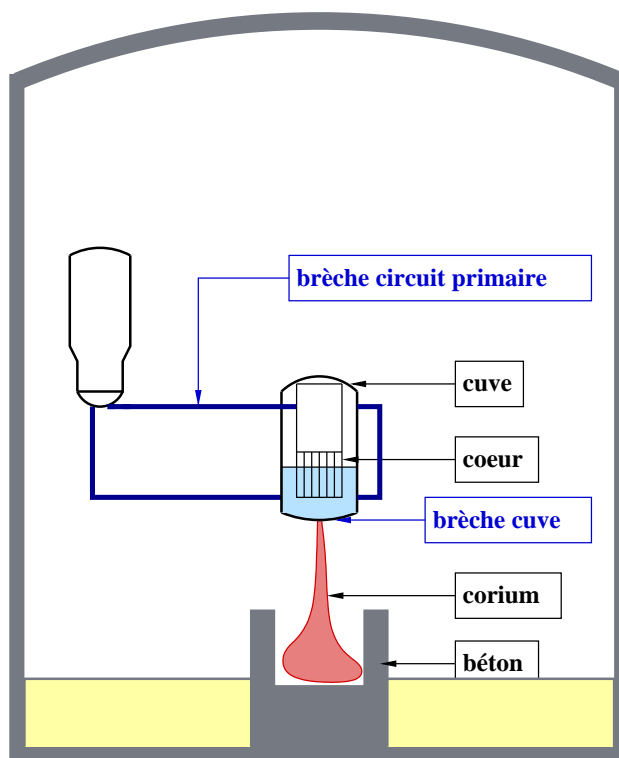


FIG. 1 – Schéma simplifié d'un réacteur en situation accidentelle

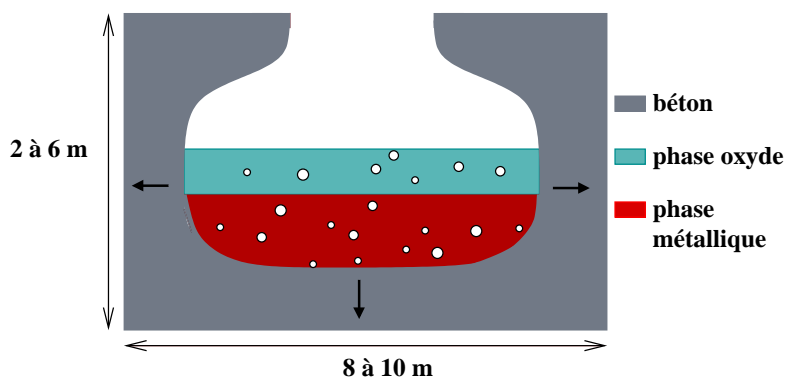


FIG. 2 – Interaction corium-béton dans une situation stratifiée

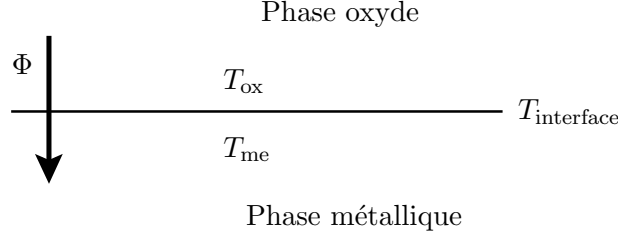


FIG. 3 – Représentation par zones en configuration stratifiée

Le code d'évaluation réacteur MEDICIS

Afin de simuler l'ensemble d'un hypothétique accident grave dans un réacteur à eau pressurisée, depuis l'événement initiateur jusqu'à l'éventuel relâchement de produits radioactifs à l'extérieur de l'enceinte de confinement, l'IRSN et son homologue allemand GRS (Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH) développent un système de codes, appelé ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) [102].

Le module MEDICIS (Model of Erosion Due to Interaction of Corium with basemat Substrate) [29] décrit au sein de ASTEC le comportement à long terme du corium hors-cuve durant l'accident.

La modélisation qui y est adoptée repose sur une décomposition du système physique en une collection de zones aux propriétés homogènes, dont l'évolution est régie par des échanges de matière et d'énergie. La nature et l'intensité de ces transferts sont déterminées à partir des caractéristiques internes de chaque zone par un ensemble de relations phénoménologiques communément appelées "corrélations", dont le choix et la pertinence conditionnent largement la validité du code et le caractère prédictif de ses résultats.

De nombreux phénomènes complexes sont pris en compte dans MEDICIS : l'ablation du puits de cuve (interaction corium/béton), l'évolution thermique et physico-chimique du bain fondu de corium, la formation de croûtes aux frontières du bain, les transferts de masse et de chaleur avec les parois de béton, le transfert de chaleur par convection et par rayonnement à l'interface supérieure et le renoyage du bain de corium par l'injection d'eau à la surface supérieure du bain. De plus, MEDICIS gère le changement de configurations (homogènes ou stratifiées) du bain de corium.

On s'intéresse ici plus particulièrement à la modélisation dans le code des échanges entre les phases oxyde et métallique lors du passage de bulles en configuration stratifiée. Une température moyenne est associée à chacune des phases et la densité de flux thermique Φ (figure 3) est exprimée sous la forme

$$\Phi = h_{ox} (T_{ox} - T_{interface}) = h_{me} (T_{interface} - T_{me})$$

où $T_{interface}$ est la température d'interface, T_{ox} et T_{me} sont respectivement les températures moyennes des phases oxyde et métallique, h_{ox} et h_{me} sont des coefficients d'échange associés à chacune des phases qui prennent en compte le bullage.

Les corrélations utilisées pour calculer h_ℓ ($\ell = ox$ ou me) sont celles obtenus expérimentalement par Greene *et al.* [49, 52] où les couples simulants eau/mercure et huile/mercure ont été choisis pour qu'il n'y ait pas d'entraînement :

$$\mathbf{Nu} = 1.95 \mathbf{Re}^{0.72} \mathbf{Pr}^{0.72},$$

avec $\mathbf{Nu} = \frac{h_\ell r_b}{\lambda_\ell}$, $\mathbf{Re} = \frac{\varrho_\ell J_g r_b}{\eta_\ell}$, $\mathbf{Pr} = \frac{\eta_\ell c_{p\ell}}{\lambda_\ell}$ ce qui donne

$$h_\ell = 1.95 r_b^{-0.28} \lambda_\ell^{0.28} (\varrho_\ell c_{p\ell} J_g)^{0.72}.$$

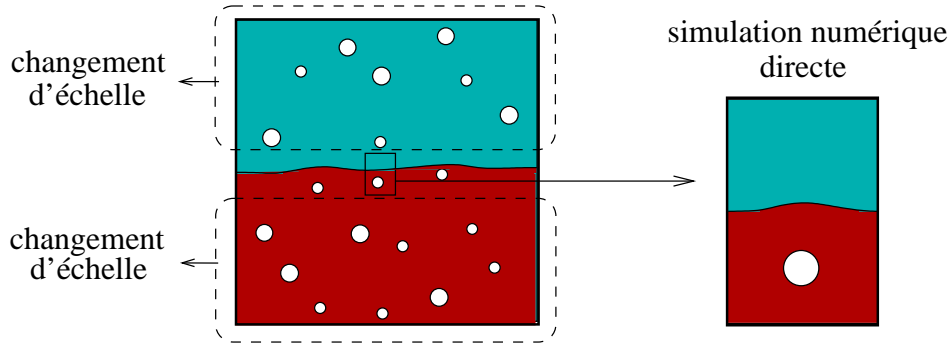


FIG. 4 – Modélisation possible du bain de corium lors du passage de bulles

Ce coefficient h_ℓ dépend

- du rayon moyen des bulles r_b (en m),
- de la conductivité thermique de la phase liquide λ_ℓ (en $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$),
- de la masse volumique de la phase liquide ρ_ℓ (en kg.m^{-3}),
- de la chaleur massique de la phase liquide $c_{p\ell}$ (en $\text{J.kg}^{-1}\text{K}^{-1}$),
- du flux gazeux J_g (en m.s^{-1}).

Il y a actuellement une forte incertitude sur le choix de ces coefficients puisque d'autres codes existants pour l'étude de l'interaction corium-béton utilisent des coefficients différents de plusieurs ordres de grandeurs (un facteur 100). De plus, des questions restent ouvertes par rapport à leur pertinence, notamment :

- les simulants utilisés sont-ils représentatifs des phases oxyde et métallique ?
- l'absence d'entraînement est-elle représentative des écoulements qui ont lieu dans le bain ?
- les viscosités ou les tensions de surface n'influent-elles pas ?

Afin de mieux comprendre l'interaction entre les phases et appuyer un choix de corrélations, on propose une description plus fine du bain. Dans chacune des phases, une approche avec changement d'échelle est utilisée pour modéliser les écoulements diphasiques oxyde/gaz, métal/gaz (par exemple les modèles développés dans [4, 55, 56]). Une des difficultés réside dans la manière de relier les deux systèmes en prenant en compte les transferts. L'objectif de la thèse est l'étude qualitative et quantitative de ces échanges au voisinage de l'interface oxyde/métal par simulation numérique directe (figure 4).

Cette étude permettra d'avoir une meilleure connaissance des paramètres susceptibles d'agir sur les transferts comme par exemple

- la taille et la forme des bulles,
- le flux gazeux,
- le rapport des masses volumiques entre les phases en présence,
- la tension de surface entre les phases,
- la structure de l'écoulement (bain au repos ou siège de phénomènes de convection naturelle),

et d'orienter un choix de corrélations pour le code MEDICIS.

Choix d'un modèle mathématique

Pour l'étude des échanges de masse et de chaleur entre les phases oxyde et métallique lors du passage de bulles, on est amené à étudier des écoulements avec les caractéristiques suivantes :

- présence de trois phases non miscibles, sans changement de phase,
- géométrie 3D,

- forts changements topologiques des interfaces : coalescence de bulles, rupture des interfaces,
- écoulements incompressibles,
- propriétés physiques différentes entre chaque phase : tensions de surface, masse volumique, viscosité.

Pour la simulation d'écoulements multiphasiques, il existe deux familles principales :

1. les méthodes de type reconstruction des interfaces, comme par exemple Volume Of Fluid, notées VOF [79, 90] ou Front-Tracking [93, 100, 101],
2. les méthodes de type suivi implicite des interfaces qui mettent en jeu par exemple des techniques à base de lignes de niveau [85, 92] (Level-Set) ou d'interfaces diffuses [15, 59].

Kim et Lowengrub [71] proposent une description générale de ces différentes méthodes qui sont souvent utilisées pour des écoulements diphasiques. Quelques résultats ont été récemment obtenus pour la simulation d'écoulements triphasiques, avec différentes approches comme par exemple les méthodes VOF [28], les méthodes Level-Set [94] et les modèles à interfaces diffuses [70].

Nous nous sommes intéressés plus particulièrement à la méthode Level-Set et aux modèles à interfaces diffuses qui présentaient un système d'équations facile à appréhender numériquement avec l'outil PELICANS¹ [88], développé à l'IRSN et qui sont réputés pertinents pour la simulation des écoulements tridimensionnels avec de forts changements topologiques des interfaces (au moins dans le cas diphasiques).

Nous proposons des brèves descriptions de la méthode Level-Set et des modèles à interfaces diffuses dans le cas diphasique. Puis nous discutons des difficultés posées par chacune d'elles pour l'écriture d'un modèle à trois phases.

Méthode Level-Set

La méthode Level-Set a été introduite par Osher et Sethian [86] en 1988. Elle est couramment utilisée notamment pour le traitement d'images et aussi pour la simulation d'écoulements diphasiques [84, 85, 91, 92].

Dans cette méthode, la position de la frontière I_i d'une phase i est décrite par la fonction scalaire ϕ_i , appelée fonction Level-Set, définie sur tout le domaine d'étude Ω , telle que $\phi_i(x)$ est la distance signée (positive si x est dans la phase i , négative sinon) de x à la surface singulière I_i . La position de cette dernière est donc donnée par la ligne de niveau 0 de ϕ_i .

Dans le cas diphasique, la répartition géométrique des phases peut alors être décrite par une seule fonction Level-Set ϕ solution d'une équation de transport.

Numériquement, l'interface est artificiellement épaissie notamment pour la représentation de la force de tension de surface qui est approchée par une force volumique (approche du type "CSF", Continuum Surface Force [18]) et pour les propriétés physiques comme la masse volumique ou la viscosité qui sont régularisées [96].

La propriété que ϕ est une distance reste l'une des contraintes fortes posée par les méthodes Level-Set. Or cette propriété n'est pas conservée par l'équation de transport vérifiée par ϕ . Il convient donc de réinitialiser régulièrement ϕ , ce qui constitue une difficulté majeure. De plus, le volume des phases n'est pas conservé.

Récemment la méthode Level-Set a été couplée à la méthode des éléments finis dite "étendue" (XFEM) pour représenter directement les discontinuités de valeurs et de gradients *via* un enrichissement dynamique des espaces d'approximation, ce qui évite les pertes de précision inhérentes au lissage des sauts et des termes interfaciaux [11, 63].

¹Plateforme Evolutive de Librairies de Composants pour l'Analyse Numérique et Statistique

La méthode Level-Set a été aussi couplée avec la méthode VOF [97]. La fraction volumique utilisée en VOF permet de conserver le volume des phases et la fonction Level-Set sert à décrire l'interface.

Modèles à interfaces diffuses

Nous nous intéressons ici à une classe de modèles reposant sur une représentation des interfaces par des zones d'épaisseur finie, certes faibles mais supérieures aux épaisseurs réelles [3]. Chaque phase est représentée par une fonction régulière, volumique, appelée paramètre d'ordre ou champ de phase, qui prend ses valeurs entre 0 et 1. Ces approches ont été utilisées pour la simulation d'écoulements multiphasiques [5, 15, 24, 68, 73] ou des écoulements avec changements de phases [23, 61, 80, 81].

On s'est intéressé plus particulièrement au modèle de Cahn-Hilliard qui a été introduit en 1958 [22], notamment pour l'étude de décompositions spinodales [21].

Dans cette approche, l'évolution du système est dirigée par le gradient d'une énergie libre totale qui s'écrit comme la somme de deux termes : un terme non convexe appelé potentiel de Cahn-Hilliard (énergie libre de volume) et un terme capillaire dépendant du gradient du paramètre d'ordre. Dans [14, 15, 59, 60, 74], les équations de Cahn-Hilliard sont couplées aux équations de Navier-Stokes afin de décrire des écoulements composés de phases miscibles ou non miscibles. La force de tension de surface est représentée par une force capillaire volumique, non nulle seulement dans la zone interfaciale. Comme pour la méthode Level-Set, les paramètres physiques sont approchés par des fonctions régulières en utilisant la définition du paramètre d'ordre. Un des avantages du modèle de Cahn-Hilliard est que le volume des phases est conservé.

Plusieurs généralisations de Cahn-Hilliard ont été proposées et étudiées, comme par exemple le modèle de Cahn-Hilliard-Gurtin qui prend en compte le travail de microforces internes ainsi que les déformations du matériau [13, 57, 78], ou le modèle de Cahn-Hilliard visqueux développé à l'origine pour décrire la séparation de phase dans des systèmes composés de verre et de polymères [82]. Le contexte de ces travaux (mécanique du solide) sort du cadre de cette étude.

Difficultés posées par l'écriture d'un modèle à trois phases

Pour décrire un écoulement triphasique avec la méthode Level-Set, nous pouvons utiliser trois fonctions ϕ_i qui sont alors liées par la contrainte

$$\text{si } x \text{ appartient à la phase } i \text{ alors } \begin{cases} \phi_i(x) > 0 \\ \exists j \neq i \text{ tel que } \phi_i(x) = -\phi_j(x) \\ \forall k \neq i, j, \phi_k(x) \leq \phi_j(x) \end{cases} \quad (1)$$

Si ces trois fonctions évoluent indépendamment l'une de l'autre, les erreurs numériques entraînent l'apparition de vide (les trois fonctions sont négatives) ou de recouvrements (deux fonctions sont positives) notamment au voisinage des points triples. Cette difficulté, qui a fait l'objet de développements parfois complexes [77, 94, 108], reste un sujet de recherche actif.

Etant données les contraintes (1), il est possible de décrire des écoulements multiphasiques avec moins de fonctions Level-Set que de phases. Par exemple, deux fonctions Level-Set permettent de décrire jusqu'à quatre phases [103], mais les problèmes numériques précités ne sont éliminés que si le nombre de phases est pair.

La généralisation du modèle de Cahn-Hilliard pour des systèmes à plusieurs composants a été récemment développée et étudiée par exemple dans [38, 40, 46, 47, 69]. Des méthodes numériques sont aussi proposées [9, 12, 27] pour la simulation de transitions de phases à plusieurs constituants.

Enfin Kim *et al.* ont étudié la généralisation du couplage entre les équations de Cahn-Hilliard multiphasiques et les équations de Navier-Stokes ainsi que l'implémentation de solveurs numériques efficaces [66, 69, 70]. Pour la généralisation du modèle de Cahn-Hilliard à trois phases, la contrainte que doit vérifier les paramètres d'ordre est plus simple que celle pour les fonctions Level-Set puisqu'il suffit que la somme des paramètres d'ordre vaille 1. La difficulté réside, comme on le verra, dans le choix d'une énergie volumique pertinente.

Notre choix a été de poursuivre avec le modèle de Cahn-Hilliard.

Description de l'étude

Pour construire un modèle de Cahn-Hilliard triphasique, on introduit trois paramètres d'ordre. Comme on s'intéresse à des écoulements sans changement de phase composés de trois phases non miscibles, on fixe des objectifs physiques que le modèle doit vérifier. Tout d'abord, la somme des paramètres d'ordre doit valoir 1 à tout instant et en tout point du domaine. Ensuite, les équations d'évolution des paramètres d'ordre doivent être formellement identiques afin que les résultats obtenus soient indépendants du choix du paramètre d'ordre représentant chaque phase. Enfin, lorsqu'une des phases est absente, on veut retrouver le modèle de Cahn-Hilliard diphasique. On introduit la notion de *consistance algébrique* pour décrire cette dernière contrainte.

L'originalité de notre approche réside dans la forme particulière de l'énergie que nous proposons, qui permet d'avoir un modèle *algébriquement consistant*, au sens suivant : d'une part, l'énergie libre triphasique coïncide exactement avec celle du modèle de Cahn-Hilliard diphasique quand seulement deux des phases sont présentes ; d'autre part, si une phase est initialement absente alors elle n'apparaîtra pas au cours du temps. Cette propriété n'est pas satisfaite par certains modèles proposés dans la littérature et se traduit par l'apparition artificielle d'une des phases dans l'interface des deux autres comme cela a été observé par Kim et Lowengrub [70]. De plus, on vérifie que notre modèle est *dynamiquement consistant* dans le sens que des erreurs numériques pouvant introduire artificiellement une phase dans l'interface des deux autres tendent vers 0 exponentiellement en temps. Cette propriété de stabilité est importante pour les calculs numériques.

D'autre part, le choix pertinent de l'énergie libre que nous considérons, nous permet de simuler les configurations d'étalement total c'est-à-dire lorsqu'une des tensions de surface est inférieure à la somme des deux autres.

Pour décrire le système en écoulement, nous nous inspirons des travaux réalisés pour les modèles diphasiques [3, 15] où les équations de Cahn-Hilliard sont couplées à celles de Navier-Stokes. Ainsi, un terme de transport est ajouté aux équations d'évolution des paramètres d'ordre ; parallèlement, la force de tension de surface est approchée par une force capillaire volumique qui est ajoutée aux équations de Navier-Stokes. Le couplage est fait de sorte que la création d'énergie libre par convection se compense avec la création d'énergie cinétique par capillarité.

Ces travaux sont décrits dans le chapitre I.

Dans un contexte plus général que celui de phases non miscibles et en considérant seulement les équations de Cahn-Hilliard, une analyse théorique du modèle de Cahn-Hilliard triphasique est donnée dans le deuxième chapitre. Nous montrons l'existence globale et l'unicité d'une solution faible en dimension 2 et 3. Les hypothèses nécessaires pour le potentiel de Cahn-Hilliard F sont originales puisque les fonctions F considérées pour avoir les propriétés de consistance ne s'écrivent pas classiquement comme la somme d'une partie convexe et d'une partie quadratique non-convexe.

De plus, on montre l'existence et l'unicité d'une solution forte, en supposant plus de régularité sur la donnée initiale et sur la fonction F que pour les solutions faibles. En particulier, cette solution est continue en espace et en temps.

Enfin, grâce à la régularité des solutions fortes, on établit un résultat de stabilité asymptotique des états d'équilibre métastable c'est-à-dire des points de convexité de F .

Pour la résolution numérique du modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes, une semi-discrétisation temporelle est utilisée afin de découpler les problèmes de Cahn-Hilliard et de Navier-Stokes dans un pas de temps et une méthode des éléments finis est employée pour la discrétisation spatiale.

Les discrétisations sont choisies de sorte que le problème discret vérifie des propriétés similaires au problème continu : la conservation du volume des phases, l'estimation de l'énergie et la conservation de la somme des paramètres d'ordre qui doit valoir 1. En effet, la façon de discrétiser en temps les termes non linéaires dans les équations de Cahn-Hilliard est cruciale pour établir l'estimation d'énergie qui permet en particulier de montrer l'existence de la solution discrète. De plus, des contraintes apparaissent sur le choix des éléments d'approximation des inconnues pour que le modèle vérifie la conservation du volume des phases et de la somme des paramètres d'ordre. Notamment, nous prenons le même élément pour approcher les paramètres d'ordre et la pression.

Classiquement, les conditions au bord pour les paramètres d'ordre sont des conditions de Neumann homogènes. Pour les applications du chapitre IV où un train de bulles est simulé, nous prenons en compte aussi des conditions au bord mixtes, de Dirichlet et de Neumann. La difficulté réside dans l'écriture de la formulation variationnelle pour avoir la conservation du volume des phases.

Comme on a construit et discrétisé le modèle de sorte que la somme des paramètres d'ordre soit égale à 1, on résout seulement deux équations de Cahn-Hilliard, la troisième est remplacée par $c_3 = 1 - c_1 - c_2$.

La description du schéma numérique utilisé et de ses propriétés font l'objet du chapitre III.

Afin de valider le modèle, différentes applications numériques sont proposées dans le chapitre IV.

La première étude porte sur une configuration diphasique : l'ascension d'une bulle dans un liquide. Les résultats obtenus sont comparés à la fois aux résultats expérimentaux répertoriés par Clift *et al.* [26] et numériques obtenus par différentes modélisations des interfaces comme par exemple la méthode VOF [76] ou la méthode Level-Set [95].

On s'intéresse ensuite à des configurations triphasiques. Le premier exemple est le cas classique d'une lentille piégée entre deux phases stratifiées. Le modèle donne des résultats satisfaisants pour le calcul des angles de contact et des sauts de pression [87, 89].

La deuxième application triphasique est l'étude du comportement d'une bulle dans un bain stratifié. Nous comparons qualitativement nos résultats avec ceux observés expérimentalement par Greene *et al.* [50, 51] en s'intéressant en particulier au passage de la bulle, à l'entraînement de la phase lourde dans la phase légère et à l'influence des masses volumiques et des viscosités sur la quantité de volume entraîné.

Après avoir étudié les échanges de masse, on étudie les transferts de chaleur entre deux phases stratifiées lors du passage d'une bulle puis d'un train de bulles. On s'intéresse en particulier au flux thermique entre les phases liquides. Comme les interfaces sont épaissies, on approche le flux par une intégrale volumique en utilisant la définition des paramètres d'ordre.

Ces études ont permis de mettre en place les outils pour l'étude des échanges de masse et de chaleur entre les deux phases du corium lors du passage de bulles (calcul du flux thermique, mise en place d'un train de bulles). Dans le cas du corium, les écoulements sont plus complexes que dans les études précédentes car il y a des écarts de masses volumiques importants, la viscosité dans la phase lourde est faible et les tensions de surface sont grandes. Des premiers résultats sont obtenus pour le passage d'une bulle à travers l'interface oxyde/métal.

Le modèle à interfaces diffuses proposé donne des résultats satisfaisants dans un grand nombre de situations (en particulier les configurations d'étalement total qui n'étaient pas atteignables

jusqu'à présent). Avant de poursuivre les études, il faudrait pousser plus avant l'analyse des schémas afin de réduire les problèmes numériques qui apparaissent dans les situations extrêmes de grand contraste de viscosité, de masse volumique et de tension de surface.

Chapitre I

Modèle de Cahn-Hilliard triphasique

Dans ce chapitre, nous allons construire un modèle pour décrire des mélanges à trois phases non miscibles, basé sur le modèle de Cahn-Hilliard.

Pour établir le modèle, on introduit trois paramètres d'ordre et on impose que la somme des paramètres d'ordre vaille 1 à chaque instant et en tout point. On retrouve cette condition dans les différents modèles multiphasiques de la littérature [46, 47]. Le modèle présenté ici se distingue par la forme de l'énergie libre adoptée. En effet, grâce à un choix pertinent de l'énergie libre de volume, notre modèle coïncide exactement avec le modèle de Cahn-Hilliard diphasique (décrit dans §I.1, [34, 73]) quand seulement deux phases sont présentes dans le système. Dans ce cas, on dira que le modèle est *algébriquement consistant* avec les systèmes binaires. Cette propriété assure qu'il n'y aura pas d'apparition artificielle d'une des phases au niveau de l'interface entre les deux autres. De plus, on montre que le problème est bien posé et qu'il est *dynamiquement consistant* avec les systèmes diphasiques. Cette propriété de stabilité asymptotique est importante pour les calculs numériques. En effet, elle garantit que des erreurs numériques pouvant introduire artificiellement une phase dans l'interface entre les deux autres, tendent vers zéro exponentiellement en temps, en un certain sens qui sera défini. Des exemples numériques sont donnés dans le chapitre afin d'illustrer ces résultats. Pour cela on s'intéresse à l'état d'équilibre d'une lentille piégée entre deux phases stratifiées [94]. Une étude plus détaillée de ce problème, ainsi que les schémas numériques utilisés sont donnés dans le paragraphe IV.2 et le chapitre III.

Pour décrire le système en écoulement, nous nous inspirons des travaux réalisés pour les modèles diphasiques [3, 15]. Les équations de Cahn-Hilliard sont couplées avec les équations de Navier-Stokes dans le cas d'un écoulement incompressible (au sens où la vitesse est à divergence nulle). Ces équations sont définies sur tout le domaine (il n'y a pas de conditions de sauts) et les forces de tensions de surface sont prises en compte à travers des forces volumiques capillaires [67].

Le premier paragraphe du chapitre est consacré à la description du modèle de Cahn-Hilliard diphasique. Certains développements sont précisés dans l'annexe A. Dans la seconde partie, la construction du modèle de Cahn-Hilliard triphasique est décrite en donnant seulement une forme générale de l'énergie libre. Sous certaines hypothèses de régularité et de croissance pour l'énergie libre volumique, nous présentons un théorème d'existence globale et d'unicité des solutions faibles (théorème I.2.7 page 29). Les hypothèses nécessaires pour la preuve du théorème sont plus générales que celles usuelles dans la littérature ce qui le rend applicable pour les différents modèles que nous étudierons dans la suite, notamment ceux utilisés pour la description d'étalements totaux.

La preuve de ce théorème, ainsi que des résultats d'existence de solutions plus régulières et de stabilité font l'objet du chapitre II.

Dans le troisième paragraphe, nous montrons que l'énergie de volume doit posséder une forme particulière pour obtenir un modèle *algébriquement consistant* au sens de la définition I.3.8. Des

exemples de telles énergies sont donnés dans les paragraphes I.3.2 et I.3.4. Une analyse est faite pour chacun d'eux et nous illustrons ce travail par des exemples numériques. De plus, nous prouvons que sous certaines hypothèses, les modèles considérés sont *dynamiquement consistants* avec les systèmes diphasiques. Dans la dernière partie, nous présentons le modèle couplé de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes triphasique qui permet la description d'écoulements ternaires, incompressibles et anisothermes.

L'essentiel de ce chapitre et du suivant a fait l'objet d'un article à paraître dans M²AN [17].

I.1 Modèle de Cahn-Hilliard diphasique

Pour commencer, nous donnons une brève description du modèle de Cahn-Hilliard pour deux constituants non miscibles.

On note Ω un ouvert borné, connexe de \mathbb{R}^d où d est la dimension de l'espace, avec une frontière Γ suffisamment régulière.

Le principe de ce modèle repose sur le postulat que l'interface entre les deux phases présentes dans le système est d'épaisseur, non nulle, ε . La composition du mélange est décrite en chaque point par une fonction continue, appelée paramètre d'ordre c qui est typiquement la concentration d'un des constituants du système. Le paramètre d'ordre prend la valeur 1 dans une des phases et 0 dans l'autre et varie rapidement mais continûment dans l'interface (figure I.1).

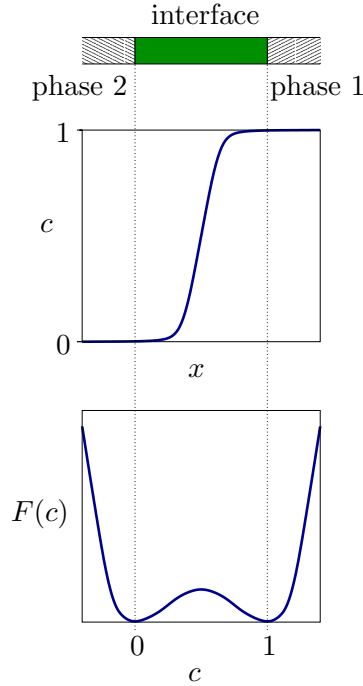


FIG. I.1 – Variation du paramètre d'ordre entre les deux phases et structure en double puits du potentiel de Cahn-Hilliard F

De plus, l'évolution du système est décrite à travers la minimisation d'une énergie libre. L'expression de l'énergie libre du mélange qui dépend de deux paramètres ε (l'épaisseur d'interface) et σ (la tension de surface) s'écrit

$$\mathcal{F}_{\sigma, \varepsilon}^{\text{diph}}(c) = \int_{\Omega} \left[\frac{12}{\varepsilon} F(c) + \frac{3}{4} \sigma \varepsilon |\nabla c|^2 \right] dx \quad (\text{I.1})$$

avec $F(c) = \sigma c^2(1 - c)^2$. Le premier terme, dit énergie de volume (“bulk energy”), est positif. La fonction F , appelée potentiel de Cahn-Hilliard (ou énergie libre volumique), possède une structure classique en double puits, avec deux minima pour $c = 0$ et $c = 1$ (figure I.1), correspondant aux deux phases pures. Cette énergie de volume tend à réduire la taille des zones interfaciales alors que le second terme en $|\nabla c|^2$, appelé terme capillaire, tend à l’augmenter.

Le profil d’équilibre d’une interface plane infinie peut se calculer explicitement en résolvant le problème (annexe A) posé dans la direction normale à l’interface par

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{3}{2}\sigma\varepsilon c_0'' + 24\frac{\sigma}{\varepsilon}c_0(1 - c_0)(1 - 2c_0) = 0, \\ \lim_{+\infty} c_0 = 1, \\ \lim_{-\infty} c_0 = 0, \\ c_0(0) = \frac{1}{2}, \end{array} \right.$$

qui a pour solution

$$c_0(x) = 0.5 \left(1 + \tanh \left(\frac{2x}{\varepsilon} \right) \right).$$

Ainsi, on peut voir que ε peut être considérée comme une longueur caractéristique de transition entre les deux états stables $c = 0$ et $c = 1$, appelée *interface*. De plus, le calcul de l’énergie libre totale donne pour ce profil d’interface (annexe A)

$$\int_{\mathbb{R}} \mathcal{F}_{\sigma,\varepsilon}^{\text{diph}}(c_0) dx = \sigma.$$

Le paramètre σ introduit dans le modèle, est exactement l’énergie que coûte l’interface par unité de surface, c’est-à-dire la tension de surface. Un avantage important du modèle de Cahn-Hilliard est que les deux paramètres physiques σ et ε peuvent être imposés indépendamment l’un de l’autre et de façon explicite dans le modèle.

Une fois que l’énergie libre $\mathcal{F}_{\sigma,\varepsilon}^{\text{diph}}$ est définie, on peut décrire l’évolution en temps du mélange, grâce aux équations de Cahn-Hilliard

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (M_0 \nabla \mu) = 0, \\ \mu = \frac{\delta \mathcal{F}_{\sigma,\varepsilon}^{\text{diph}}}{\delta c} = -\frac{3}{2}\sigma\varepsilon \Delta c + 24\frac{\sigma}{\varepsilon}c(1 - c)(1 - 2c). \end{array} \right. \quad (\text{I.2})$$

Cette équation est une équation de flot de gradient de la fonctionnelle $\mathcal{F}_{\sigma,\varepsilon}^{\text{diph}}$ par rapport à c , sous la contrainte de conservation de la masse totale, pour le produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{-1}$ (annexe A, [75]), défini sur $L_m^2(\Omega) = \{\varphi \in L^2(\Omega) \mid \int_{\Omega} \varphi dx = 0\}$ par

$$(f, v)_{-1} = \int_{\Omega} \nabla \varphi_f \cdot \nabla \varphi_v dx, \quad \forall f, v \in L_m^2(\Omega)$$

où φ_f est la solution dans $L_m^2(\Omega) \cap H^2(\Omega)$ de

$$\left\{ \begin{array}{l} -\Delta \varphi_f = f \text{ sur } \Omega, \text{ avec } f \in L_m^2(\Omega), \\ \frac{\partial \varphi_f}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma. \end{array} \right.$$

La dérivée fonctionnelle de l'énergie par rapport au paramètre d'ordre, notée μ , est appelé *potentiel chimique* du mélange et le coefficient M_0 (qui peut dépendre de c) est un coefficient de diffusion appelé *mobilité*.

Les conditions au bord sont des conditions de Neumann homogènes pour toutes les inconnues

$$\nabla c \cdot n = M_0 \nabla \mu \cdot n = 0. \quad (\text{I.3})$$

La condition sur le potentiel chimique assure qu'il n'y a pas de diffusion vers l'extérieur du domaine, celle sur le paramètre d'ordre impose que l'interface soit orthogonale au bord. Il est possible de considérer d'autres angles de contact avec la frontière du domaine, en appliquant des conditions de Neumann non linéaires et non homogènes pour c [60].

Remarque I.1.1

Notons que c étant la concentration d'une des deux phases du mélange, elle doit vérifier $0 \leq c \leq 1$. Mais cette propriété n'est pas vraie en général pour les solutions de (I.2)-(I.3). C'est un inconvénient de ce type d'approche qui sera rencontré aussi pour les systèmes ternaires dans la suite. Pour assurer que les valeurs du paramètre d'ordre restent entre 0 et 1, il suffit de prendre une mobilité dégénérée ($M_0(c) = c^2(1-c)^2$) ou un potentiel de Cahn-Hilliard non régulier (par exemple sous forme logarithmique avec des singularités en 0 et en 1). Dans ces cas, l'analyse est plus compliquée [9, 14] et en particulier, on perd de la régularité sur la solution et l'unicité de celle-ci. Nous nous intéresserons dans la suite, pour mener l'analyse, à des mobilités non-dégénérées et des potentiels de Cahn-Hilliard réguliers.

I.2 Modèle de Cahn-Hilliard pour un mélange à trois constituants

Le but de cette partie est de proposer une généralisation du modèle à interface diffuse présenté précédemment dans le cas d'un système constitué de trois phases non miscibles. Comme pour le cas du modèle diphasique, les paramètres physiques sont les tensions de surface σ_{12} , σ_{13} et σ_{23} entre deux des trois constituants, supposées constantes et l'épaisseur d'interface $\varepsilon > 0$, qui est supposée la même pour toutes les interfaces. Cette hypothèse n'est pas restrictive puisque en pratique dans les calculs numériques, le paramètre ε est choisi pour que l'interface contienne au moins 2 à 3 mailles. Le point clé est qu'une modification de l'épaisseur d'interface peut être faite sans changer les tensions de surface dans le modèle.

I.2.1 Etablissement du modèle

Tout d'abord, nous décrivons un système ternaire en utilisant trois paramètres d'ordre c_1 , c_2 et c_3 , chacun étant la concentration d'un des composants du système. Les trois inconnues sont alors liées par la relation

$$c_1 + c_2 + c_3 = 1. \quad (\text{I.4})$$

Ainsi, les états admissibles appartiendront à l'hyperplan

$$\mathcal{S} = \left\{ (c_1, c_2, c_3) \in \mathbb{R}^3, \quad c_1 + c_2 + c_3 = 1 \right\}. \quad (\text{I.5})$$

Pour simplifier les notations, on écrit $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)$, $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3)$ et on définit l'espace $\mathbb{H}_{\mathcal{S}}^1(\Omega)$ par

$$\mathbb{H}_{\mathcal{S}}^1(\Omega) = \left\{ \mathbf{c} \in (\mathbb{H}^1(\Omega))^3 \mid \mathbf{c}(x) \in \mathcal{S} \text{ pour presque tout } x \in \Omega \right\}.$$

Il faut ensuite définir l'énergie de Cahn-Hilliard pour un tel système. D'après le cas diphasique, il est naturel de chercher une énergie qui s'écrit comme la somme d'une énergie de volume avec un potentiel de Cahn-Hilliard $F(c_1, c_2, c_3)$ non-convexe possédant une structure en "triple puits" et des termes capillaires $|\nabla c_i|^2$. Sans perte de généralité, l'énergie libre est définie comme suit

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(c_1, c_2, c_3) = \int_{\Omega} \left[\frac{12}{\varepsilon} F(c_1, c_2, c_3) + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_1 |\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_2 |\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_3 |\nabla c_3|^2 \right] dx, \quad (\text{I.6})$$

où $\Sigma = (\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$ est un paramètre du modèle. Les coefficients $(\Sigma_i)_i$, appelés dans la suite coefficients de capillarité, sont constants et peuvent être négatifs mais non nuls. A noter que les coefficients 12 et $\frac{3}{8}$ sont naturels par rapport à l'expression de l'énergie libre dans le cas diphasique (I.1). Dans cette définition, il reste à déterminer la fonction F et le paramètre Σ . Ce travail sera fait dans la section I.3 en demandant que le modèle triphasique soit consistant avec le modèle (I.2) lorsque seulement deux constituants sont présents dans le système. Nous présentons, maintenant, l'établissement des équations d'évolution des paramètres d'ordre.

L'évolution en temps de \mathbf{c} est donnée par le flot de gradient de $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}$ pour le produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{-1}$ défini sur $L_m^2(\Omega)$ (conservation de la masse totale) sous la contrainte (I.4) qui doit être vraie dans tout le domaine et à chaque instant. Pour respecter cette contrainte, nous introduisons un multiplicateur de Lagrange β (voir également [46]). Le système des équations d'évolution s'écrit alors pour $i = 1, 2, 3$

$$\begin{cases} \frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot (M_i \nabla \mu_i), \\ \mu_i = \frac{\delta \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}}{\delta c_i} + \beta = -\frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i + \frac{12}{\varepsilon} \partial_i F(\mathbf{c}) + \beta. \end{cases} \quad (\text{I.7})$$

Pour éliminer β , on s'intéresse à l'équation vérifiée par l'inconnue $S = c_1 + c_2 + c_3$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^3 M_i \nabla \mu_i \right). \quad (\text{I.8})$$

Pour que la contrainte (I.4) soit satisfaite partout, nous voulons que $S \equiv 1$ soit solution de l'équation (I.8). Ceci n'est possible que sous la condition

$$M_1 \Sigma_1 = M_2 \Sigma_2 = M_3 \Sigma_3 \stackrel{\text{def}}{=} M_0.$$

La somme S vérifie alors

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M_0 \nabla \left(-\frac{3}{4} \varepsilon \Delta S + \beta \left(\frac{1}{\Sigma_1} + \frac{1}{\Sigma_2} + \frac{1}{\Sigma_3} \right) + \frac{12}{\varepsilon \Sigma_1} \partial_1 F(\mathbf{c}) + \frac{12}{\varepsilon \Sigma_2} \partial_2 F(\mathbf{c}) + \frac{12}{\varepsilon \Sigma_3} \partial_3 F(\mathbf{c}) \right) \right). \quad (\text{I.9})$$

On voit que $S \equiv 1$ est solution de (I.9) si et seulement si le multiplicateur de Lagrange est défini par

$$\beta = - \sum_{i=1}^3 \frac{4 \Sigma_T}{\varepsilon \Sigma_i} \partial_i F(\mathbf{c}),$$

où Σ_T est donné par

$$\frac{3}{\Sigma_T} = \frac{1}{\Sigma_1} + \frac{1}{\Sigma_2} + \frac{1}{\Sigma_3}.$$

Remarque I.2.2

Σ_T est bien défini si et seulement si $\Sigma_1\Sigma_2 + \Sigma_1\Sigma_3 + \Sigma_2\Sigma_3 \neq 0$. On suppose dorénavant que cette condition est vérifiée (voir également §I.2.2).

En utilisant l'expression de β , le système ternaire (I.7) s'écrit finalement pour $i = 1, 2, 3$

$$\begin{cases} \frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right), \\ \mu_i = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c})) \right) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i. \end{cases} \quad (\text{I.10})$$

Le système (I.10) ainsi construit, assure que si la donnée initiale est admissible, c'est-à-dire $\mathbf{c}(0) \in \mathcal{S}$, alors $\mathbf{c}(t) \in \mathcal{S}$ pour tout $t > 0$. On peut donc éliminer *a posteriori* une des trois inconnues c_1, c_2 ou c_3 , qui pourra être calculée par l'équation $1 = c_1 + c_2 + c_3$. De la même manière, les trois potentiels chimiques (μ_1, μ_2, μ_3) sont liés par la relation

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\mu_i}{\Sigma_i} = 0. \quad (\text{I.11})$$

Numériquement, seulement deux équations de Cahn-Hilliard sont résolues, la troisième inconnue étant donnée par (I.4). Cependant, pour l'étude théorique du modèle, il est nécessaire de travailler avec le système complet (I.10). Notons que l'élimination d'une des inconnues *a posteriori* n'a aucune influence sur la solution obtenue. Ce n'est pas le cas, par exemple, pour les modèles développés par Kim et Lowengrub [66, 70] où l'élimination d'un des paramètres d'ordre est faite au début de la modélisation (§I.3.2). Nous comparons les deux modèles sur un exemple numérique dans le paragraphe I.3.3.

Enfin, comme dans le cas diphasique, les inconnues (c_i, μ_i) vérifient des conditions de Neumann homogènes sur le bord Γ

$$\nabla c_i \cdot n = M_0 \nabla \mu_i \cdot n = 0 \text{ avec } i = 1, 2, 3, \quad (\text{I.12})$$

ce qui assure que le volume de chaque phase est conservé au cours du temps

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} c_i dx = \int_{\Omega} \frac{\partial c_i}{\partial t} dx = \int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right) dx = \int_{\Gamma} \frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \cdot n ds = 0.$$

I.2.2 Coercivité des termes capillaires

Pour que le système soit bien posé, on voit qu'il faut, au minimum, que l'énergie libre (I.6) soit minorée. On s'intéresse ici aux termes capillaires $\frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i |\nabla c_i|^2$. La contribution de l'énergie de volume sera traitée dans le paragraphe I.3 où la construction de la fonction F est décrite.

La contribution des termes capillaires dans l'énergie doit être positive. En effet, la création d'interface doit coûter de l'énergie au système, sinon il va évoluer en ajoutant des interfaces. Si tous les coefficients Σ_i sont positifs, la somme des termes capillaires est positive. Par contre, si un des coefficients Σ_i est négatif, il est nécessaire d'avoir une hypothèse supplémentaire sur Σ . C'est l'objet de la proposition suivante.

Proposition I.2.3

Soit $\Sigma = (\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3) \in \mathbb{R}^3$. Il existe $\underline{\Sigma} > 0$ tel que pour tout $n \geq 1$

$$\forall (\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in (\mathbb{R}^n)^3, \text{ vérifiant } \xi_1 + \xi_2 + \xi_3 = 0$$

$$\Sigma_1 |\xi_1|^2 + \Sigma_2 |\xi_2|^2 + \Sigma_3 |\xi_3|^2 \geq \underline{\Sigma} \left(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2 + |\xi_3|^2 \right), \quad (\text{I.13})$$

si et seulement si les deux conditions suivantes sont satisfaites

$$\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3 > 0, \quad (\text{I.14})$$

$$\Sigma_i + \Sigma_j > 0, \quad \forall i \neq j. \quad (\text{I.15})$$

Preuve.

D'après (I.13), comme les triplets (ξ_1, ξ_2, ξ_3) satisfont $\sum_{i=1}^3 \xi_i = 0$, on peut se restreindre au cas $n = 2$. Sans perte de généralités, on peut aussi supposer que $\xi_1 = \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\xi_2 = \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}$. Ainsi la propriété (I.13) est vérifiée si et seulement si la forme quadratique suivante

$$Q(x, y, z) = \Sigma_1 x^2 + \Sigma_2 (y^2 + z^2) + \Sigma_3 ((x + y)^2 + z^2),$$

est définie positive. On introduit la matrice \mathbf{Q} associée à la forme quadratique Q définie par

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 + \Sigma_3 & \Sigma_3 & 0 \\ \Sigma_3 & \Sigma_2 + \Sigma_3 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_2 + \Sigma_3 \end{pmatrix}.$$

En utilisant le calcul des déterminants des mineurs principaux de \mathbf{Q} , il vient que la matrice est définie positive si et seulement si

$$\begin{aligned} \Sigma_1 + \Sigma_3 &> 0, \\ (\Sigma_1 + \Sigma_3)(\Sigma_2 + \Sigma_3) - \Sigma_3^2 &= \Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3 > 0, \\ \Sigma_2 + \Sigma_3 &> 0. \end{aligned}$$

Pour finir la démonstration, on note que

$$\Sigma_1 + \Sigma_2 = \frac{\Sigma_1^2 + (\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3)}{\Sigma_1 + \Sigma_3}.$$

■

En utilisant la proposition I.2.3 et en remarquant que $\sum_{i=1}^3 \nabla c_i = 0$ pour tout $\mathbf{c} \in \mathbb{H}_S^1(\Omega)$, on déduit que la somme des termes capillaires dans l'énergie libre est positive

$$\int_{\Omega} \left[\frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_1 |\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_2 |\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_3 |\nabla c_3|^2 \right] dx > 0$$

si et seulement si les coefficients Σ_i satisfont les conditions (I.14) et (I.15).

On donne maintenant un corollaire de la proposition précédente qui sera utilisé dans la suite.

Corollaire I.2.4

Soit $\Sigma = (\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3) \in \mathbb{R}^3$ tel que (I.14) et (I.15) sont vérifiées. Il existe $\bar{\Sigma} \geq 0$ tel que pour tout $n \geq 1$ et tout $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in (\mathbb{R}^n)^3$, on a

$$\Sigma_1|\xi_1|^2 + \Sigma_2|\xi_2|^2 + \Sigma_3|\xi_3|^2 \geq -\bar{\Sigma}|\xi_1 + \xi_2 + \xi_3|^2.$$

Preuve.

Introduisons

$$\xi_m = \frac{1}{3}(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3),$$

et posons $\bar{\xi}_i = \xi_i - \xi_m$. Comme la somme des $\bar{\xi}_i$ est nulle, on peut appliquer la proposition I.2.3

$$\Sigma_1|\bar{\xi}_1|^2 + \Sigma_2|\bar{\xi}_2|^2 + \Sigma_3|\bar{\xi}_3|^2 \geq \underline{\Sigma}(|\bar{\xi}_1|^2 + |\bar{\xi}_2|^2 + |\bar{\xi}_3|^2). \quad (\text{I.16})$$

Il vient

$$\begin{aligned} \Sigma_1|\xi_1|^2 + \Sigma_2|\xi_2|^2 + \Sigma_3|\xi_3|^2 &= \Sigma_1|\bar{\xi}_1 + \xi_m|^2 + \Sigma_2|\bar{\xi}_2 + \xi_m|^2 + \Sigma_3|\bar{\xi}_3 + \xi_m|^2 \\ &= \Sigma_1|\bar{\xi}_1|^2 + \Sigma_2|\bar{\xi}_2|^2 + \Sigma_3|\bar{\xi}_3|^2 + 2(\xi_m, \Sigma_1\bar{\xi}_1 + \Sigma_2\bar{\xi}_2 + \Sigma_3\bar{\xi}_3) + (\Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_3)|\xi_m|^2. \end{aligned}$$

D'après l'inégalité de Young, il existe K telle que

$$|2(\xi_m, \Sigma_1\bar{\xi}_1 + \Sigma_2\bar{\xi}_2 + \Sigma_3\bar{\xi}_3)| \leq \underline{\Sigma}(|\bar{\xi}_1|^2 + |\bar{\xi}_2|^2 + |\bar{\xi}_3|^2) + K|\xi_m|^2,$$

et en utilisant l'inégalité (I.16), il vient

$$\Sigma_1|\xi_1|^2 + \Sigma_2|\xi_2|^2 + \Sigma_3|\xi_3|^2 \geq (\Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_3 - K)|\xi_m|^2 \geq -\bar{\Sigma}|\xi_1 + \xi_2 + \xi_3|^2.$$

■

I.2.3 Existence et unicité des solutions faibles

Avant de construire le potentiel de Cahn-Hilliard pour assurer un bon comportement du modèle, on cherche à montrer l'existence des solutions faibles au problème (I.10) ce qui nous renseignera sur les propriétés que doit vérifier F . En effet, on a besoin des hypothèses suivantes pour avoir un problème bien posé :

- minoration de F : on suppose que F est de classe \mathcal{C}^2 et vérifie

$$F(\mathbf{c}) \geq 0, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}; \quad (\text{I.17})$$

- croissance polynômiale : il existe $B_1, B_2 > 0$ telles que

$$|F(\mathbf{c})| \leq B_1|\mathbf{c}|^p + B_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}, \quad (\text{I.18})$$

$$|DF(\mathbf{c})| \leq B_1|\mathbf{c}|^{p-1} + B_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}, \quad (\text{I.19})$$

$$|D^2F(\mathbf{c})| \leq B_1|\mathbf{c}|^{p-2} + B_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}, \quad (\text{I.20})$$

où $p = 6$ si $d = 3$, et $2 \leq p < +\infty$ si $d = 2$;

- minoration de la matrice hessienne de F : il existe $D_1 \geq 0$ telle que

$$(D^2F(\mathbf{c})\xi, \xi) \geq -D_1(1 + |\mathbf{c}|^q)|\xi|^2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}, \forall \xi \in \mathbb{R}^3, \quad (\text{I.21})$$

où $0 \leq q < 4$ si $d = 3$ et $0 \leq q < +\infty$ si $d = 2$.

Remarque I.2.5

On peut remplacer (I.17) par l'hypothèse que F est minorée sur \mathcal{S} puisque l'ajout d'une constante à F ne change pas les équations (I.10).

Remarque I.2.6

Les hypothèses (I.17)-(I.20) sont classiques dans l'étude des équations de Cahn-Hilliard [15, 34, 36]. Par contre, l'hypothèse (I.21) sur la minoration de la matrice hessienne de F est plus originale puisque classiquement le potentiel de Cahn-Hilliard F s'écrit comme la somme d'une partie convexe et d'une partie quadratique non-convexe [14, 99] pour lequel l'hypothèse (I.21) est satisfaite avec $q = 0$. Dans la section I.3.4, nous montrerons pourquoi il est important de considérer des énergies plus générales ce qui nécessitera des valeurs plus grandes de q . Plus précisément, l'hypothèse (I.21) n'est pas nécessaire pour prouver l'existence des solutions au problème (I.10) mais nous en avons besoin pour établir des propriétés de régularité qui impliquent l'unicité des solutions.

Enfin, on suppose que la mobilité M_0 est de classe \mathcal{C}^1 et qu'il existe $M_1, M_2, M_3 > 0$ tel que

$$M_1 \leq M_0(\mathbf{c}) \leq M_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}, \quad (\text{I.22})$$

$$|DM_0(\mathbf{c})| \leq M_3, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}. \quad (\text{I.23})$$

Si $d = 3$, la mobilité est supposée constante

$$M_0(\mathbf{c}) = M, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}. \quad (\text{I.24})$$

Théorème I.2.7 (Existence et unicité des solutions faibles)

Soit Ω un domaine régulier borné dans \mathbb{R}^d , avec $d = 2$ ou 3 . On suppose que les conditions (I.14), (I.15) et les hypothèses (I.17)-(I.21) sur F et (I.22)-(I.24) sur M_0 sont vérifiées. Quel que soit $\mathbf{c}^0 \in \mathbb{H}_S^1(\Omega)$, il existe une unique solution faible $(\mathbf{c}, \boldsymbol{\mu})$ de (I.10) sur $[0, +\infty[$ vérifiant les conditions au bord (I.12) et dont \mathbf{c}^0 est la donnée initiale telle que

$$\begin{aligned} \mathbf{c} &\in L^\infty(0, +\infty; \mathbb{H}_S^1(\Omega)) \cap L_{loc}^2(0, +\infty; (\mathbf{H}^3(\Omega))^3) \cap \mathcal{C}^0([0, +\infty[; \mathbb{H}_S^1(\Omega)), \\ \boldsymbol{\mu} &\in L^2(0, +\infty; (\mathbf{H}^1(\Omega))^3). \end{aligned}$$

En dimension 3, les hypothèses (I.22)-(I.23) suffisent pour montrer l'existence de la solution mais on a besoin de (I.24) pour prouver l'unicité. Dans le chapitre II, nous montrons l'existence de solutions ayant plus de régularité ce qui permet de prouver l'unicité avec une mobilité variable, non dégénérée.

La démonstration du théorème, ainsi que d'autres résultats de régularité sur les solutions seront donnés dans le chapitre II. Avant cela, continuons d'explorer la construction du modèle (expression de F et de $\boldsymbol{\Sigma}$).

I.3 Modèle triphasique algébriquement et dynamiquement consistant

Le but ici est de construire un modèle pour trois composants non-miscibles qui coïncide exactement avec le modèle diphasique décrit dans le paragraphe I.1 dans le cas où seulement deux phases sont présentes. On dira dans ce cas que le modèle est *algébriquement consistant*. Cette propriété n'est pas toujours vérifiée dans les modèles de la littérature [69, 47]. Des exemples numériques seront donnés afin d'illustrer l'importance de cette propriété de consistance.

I.3.1 Modèle algébriquement consistant

Nous listons tout d'abord les propriétés naturelles que l'énergie libre $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}$ définie par (I.6) et le système de Cahn-Hilliard triphasique (I.10) doivent satisfaire pour être physiquement cohérents. On considère un système composé de trois phases et σ_{12} , σ_{13} et σ_{23} sont les tensions de surface entre chaque couple de phases. On note $S_{\sigma_{ij}}^{\text{diph}}$ le système diphasique sous-jacent lorsque seulement deux phases i et j sont présentes.

Définition I.3.8

On dit que le modèle défini par (I.6) et (I.10) est algébriquement consistant avec les systèmes diphasiques $S_{\sigma_{ij}}^{\text{diph}}$ si les propriétés suivantes sont vérifiées :

(P1) Quand la phase i n'est pas présente, c'est-à-dire $c_i = 0$, l'énergie libre totale $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(c_1, c_2, c_3)$ du système doit être exactement égale à l'énergie libre totale du système diphasique contenant les deux autres phases, i.e.

$$\begin{cases} \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(c, 1 - c, 0) = \mathcal{F}_{\sigma_{12}, \varepsilon}^{\text{diph}}(c), & \forall c \in H^1(\Omega), \\ \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(c, 0, 1 - c) = \mathcal{F}_{\sigma_{13}, \varepsilon}^{\text{diph}}(c), & \forall c \in H^1(\Omega), \\ \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(0, c, 1 - c) = \mathcal{F}_{\sigma_{23}, \varepsilon}^{\text{diph}}(c), & \forall c \in H^1(\Omega). \end{cases}$$

(P2) Quand la phase i n'est pas présente dans le mélange à l'instant initial, la phase i ne doit pas apparaître durant l'évolution en temps du système, pour tout $i \in \{1, 2, 3\}$,

$$c_i(0) = 0 \implies c_i(t) = 0, \quad \forall t \geq 0.$$

Tous les paramètres ε , M_0 , σ_{12} , σ_{13} et σ_{23} étant fixés, le modèle est complètement déterminé par l'expression du potentiel F et des coefficients $\Sigma = (\Sigma_i)_i$ dans (I.6). En supposant que la fonction F est régulière, on peut maintenant donner une caractérisation complète des modèles algébriquement consistants au sens de la définition précédente.

Théorème I.3.9 (Consistance algébrique)

Soient $\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}$ trois réels positifs. Le modèle défini par (I.6) et (I.10) est algébriquement consistant avec les systèmes diphasiques $S_{\sigma_{ij}}^{\text{diph}}$ sous-jacents si et seulement si

$$\Sigma_i = \sigma_{ij} + \sigma_{ik} - \sigma_{jk}, \quad \forall i \in \{1, 2, 3\}, \quad (\text{I.25})$$

et s'il existe deux fonctions régulières G et H telles que

$$\begin{aligned} F(\mathbf{c}) = & \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 + c_1c_2c_3(\Sigma_1c_1 + \Sigma_2c_2 + \Sigma_3c_3) \\ & + c_1^2c_2^2c_3^2 G(\mathbf{c}) + (c_1 + c_2 + c_3 - 1) H(\mathbf{c}), \quad \forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3. \end{aligned} \quad (\text{I.26})$$

Remarque I.3.10

Le coefficient $S_i = -\Sigma_i$ défini par (I.25), est appelé paramètre d'étalement de la phase i aux interfaces avec les phases j et k [89]. Si S_i est positif (i.e. $\Sigma_i < 0$), l'étalement est total et si S_i est négatif, il est partiel.

Preuve.

1/ La propriété **(P1)** utilisée par exemple quand $c_1 = 0$ implique

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(0, c, 1 - c) = \mathcal{F}_{\sigma_{23}, \varepsilon}^{\text{diph}}(c), \quad \forall c \in H^1(\Omega),$$

ce qui entraîne, en utilisant (I.1) et (I.6),

$$\int_{\Omega} \left[\frac{12}{\varepsilon} F(0, c, 1 - c) + \frac{3}{8} \varepsilon (\Sigma_2 + \Sigma_3) |\nabla c|^2 \right] dx = \int_{\Omega} \left[12 \frac{\sigma_{23}}{\varepsilon} c^2 (1 - c)^2 + \frac{3}{4} \sigma_{23} \varepsilon |\nabla c|^2 \right] dx.$$

Comme cette égalité est vraie pour tout $c \in H^1(\Omega)$, on peut identifier les coefficients des termes capillaires et des deux termes de l'énergie de volume. Ceci entraîne que

$$\frac{\Sigma_2 + \Sigma_3}{2} = \sigma_{23}, \quad \text{et} \quad F(0, c, 1 - c) = \sigma_{23} c^2 (1 - c)^2, \quad \forall c \in \mathbb{R}.$$

Ainsi, en échangeant le rôle des paramètres d'ordre, on obtient

$$\frac{\Sigma_1 + \Sigma_2}{2} = \sigma_{12}, \quad \frac{\Sigma_1 + \Sigma_3}{2} = \sigma_{13}, \quad \frac{\Sigma_2 + \Sigma_3}{2} = \sigma_{23}, \quad (\text{I.27})$$

et

$$\begin{cases} F(c, 1 - c, 0) = \sigma_{12} c^2 (1 - c)^2, \\ F(c, 0, 1 - c) = \sigma_{13} c^2 (1 - c)^2, \\ F(0, c, 1 - c) = \sigma_{23} c^2 (1 - c)^2. \end{cases} \quad (\text{I.28})$$

Puis, on vérifie que (I.27) est équivalent à (I.25).

Maintenant cherchons F vérifiant (I.28) sous la forme

$$F(\mathbf{c}) = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 + J(\mathbf{c}), \quad (\text{I.29})$$

où J est une fonction régulière. De (I.28), on déduit que la propriété **(P1)** est satisfaite si et seulement si J vérifie

$$J(c, 1 - c, 0) = J(c, 0, 1 - c) = J(0, c, 1 - c) = 0, \quad \forall c \in \mathbb{R}. \quad (\text{I.30})$$

On utilise ensuite le lemme suivant dont la preuve est donnée dans l'annexe B.

Lemme I.3.11

Soit $f : \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$ une fonction régulière. Les deux propriétés suivantes sont équivalentes :

1. $f(c, 1 - c, 0) = f(c, 0, 1 - c) = f(0, c, 1 - c) = 0$, pour tout $c \in \mathbb{R}$.

2. Il existe deux fonctions régulières g et h telles que

$$f(c_1, c_2, c_3) = c_1 c_2 c_3 g(c_1, c_2, c_3) + (c_1 + c_2 + c_3 - 1) h(c_1, c_2, c_3).$$

Du lemme I.3.11 et de l'équation (I.30), on déduit qu'il existe des fonctions régulières Q et H_1 telles que

$$J(\mathbf{c}) = c_1 c_2 c_3 Q(\mathbf{c}) + (c_1 + c_2 + c_3 - 1) H_1(\mathbf{c}), \quad \forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3. \quad (\text{I.31})$$

2/ La propriété **(P2)** dit que des triplets particuliers de la forme $(c, 1 - c, 0)$, $(c, 0, 1 - c)$ et $(0, c, 1 - c)$ doivent être solutions du système triphasique (I.10) ce qui implique que

$$\left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F - \partial_j F) + \frac{1}{\Sigma_k} (\partial_i F - \partial_k F) \right) \Big|_{c_i=0, c_k=1-c_j} = 0, \quad \forall \{i, j, k\} = \{1, 2, 3\}, \forall c_j \in \mathbb{R}. \quad (\text{I.32})$$

En utilisant (I.29), on trouve que les relations (I.32) sont équivalentes aux conditions suivantes sur la fonction J

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\Sigma_2} (\partial_1 J - \partial_2 J) + \frac{1}{\Sigma_3} (\partial_1 J - \partial_3 J) \right) (0, c, 1 - c) = 2\sigma_{23}c(1 - c) \left(\frac{1}{\Sigma_2}(1 - c) + \frac{1}{\Sigma_3}c \right), \\ \left(\frac{1}{\Sigma_1} (\partial_2 J - \partial_1 J) + \frac{1}{\Sigma_3} (\partial_2 J - \partial_3 J) \right) (c, 0, 1 - c) = 2\sigma_{13}c(1 - c) \left(\frac{1}{\Sigma_1}(1 - c) + \frac{1}{\Sigma_3}c \right), \\ \left(\frac{1}{\Sigma_1} (\partial_3 J - \partial_1 J) + \frac{1}{\Sigma_2} (\partial_3 J - \partial_2 J) \right) (c, 1 - c, 0) = 2\sigma_{12}c(1 - c) \left(\frac{1}{\Sigma_1}(1 - c) + \frac{1}{\Sigma_2}c \right). \end{cases} \quad (\text{I.33})$$

De (I.31), il vient

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\Sigma_2} (\partial_1 J - \partial_2 J) + \frac{1}{\Sigma_3} (\partial_1 J - \partial_3 J) \right) (0, c, 1 - c) = \left(\frac{1}{\Sigma_2} + \frac{1}{\Sigma_3} \right) c(1 - c) Q(0, c, 1 - c), \\ \left(\frac{1}{\Sigma_1} (\partial_2 J - \partial_1 J) + \frac{1}{\Sigma_3} (\partial_2 J - \partial_3 J) \right) (c, 0, 1 - c) = \left(\frac{1}{\Sigma_1} + \frac{1}{\Sigma_3} \right) c(1 - c) Q(c, 0, 1 - c), \\ \left(\frac{1}{\Sigma_1} (\partial_3 J - \partial_1 J) + \frac{1}{\Sigma_2} (\partial_3 J - \partial_2 J) \right) (c, 1 - c, 0) = \left(\frac{1}{\Sigma_1} + \frac{1}{\Sigma_2} \right) c(1 - c) Q(c, 1 - c, 0). \end{cases} \quad (\text{I.34})$$

En comparant (I.33) et (I.34), il suit que Q doit satisfaire

$$\begin{cases} Q(0, c, 1 - c) = \Sigma_2 c + \Sigma_3 (1 - c), \quad \forall c \in \mathbb{R}, \\ Q(c, 1 - c, 0) = \Sigma_1 c + \Sigma_2 (1 - c), \quad \forall c \in \mathbb{R}, \\ Q(c, 0, 1 - c) = \Sigma_1 c + \Sigma_3 (1 - c), \quad \forall c \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (\text{I.35})$$

Cherchons maintenant Q sous la forme

$$Q(\mathbf{c}) = \Sigma_1 c_1 + \Sigma_2 c_2 + \Sigma_3 c_3 + R(\mathbf{c}), \quad \forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3. \quad (\text{I.36})$$

Les propriétés (I.35) sont équivalentes à

$$R(c, 1 - c, 0) = R(c, 0, 1 - c) = R(0, c, 1 - c) = 0, \quad \forall c \in \mathbb{R},$$

et donc le lemme I.3.11 implique que R s'écrit

$$R(\mathbf{c}) = c_1 c_2 c_3 G(\mathbf{c}) + (c_1 + c_2 + c_3 - 1) H_2(\mathbf{c}), \quad \forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3. \quad (\text{I.37})$$

En utilisant (I.29), (I.31), (I.36) et (I.37), on conclut que F vérifie (I.26). ■

Les équations (I.10) n'ont de sens que si la condition (I.4) sur la somme des paramètres d'ordre est satisfaite, c'est-à-dire sur l'hyperplan \mathcal{S} . Dans ce cas, le terme contenant la fonction H dans (I.26) ne joue pas de rôle dans le système d'équations final. Nous supposons donc que $H = 0$ dans la suite.

Remarque I.3.12 (Commentaires)

1. On remarque qu'il n'y a pas de termes croisés dans la définition de l'énergie libre. En effet, si on ajoute des termes de la forme $\nabla c_i \cdot \nabla c_j$, leurs coefficients dans l'énergie libre doivent être égaux pour assurer la propriété de consistance algébrique. L'ajout des termes croisés dans l'énergie libre revient alors à ajouter un terme de la forme $|\nabla(c_1 + c_2 + c_3)|^2$ qui n'intervient pas puisque la somme des paramètres d'ordre vaut 1.
2. Nous supposons pour construire le modèle que les tensions de surface sont constantes. La généralisation à un modèle triphasique avec des tensions de surface variables (prise en compte des effets de Marangoni par exemple) n'est probablement pas directe. Cependant, cette hypothèse n'est pas restrictive pour nos applications.
3. La description donnée dans le paragraphe I.2.1 se généralise à des systèmes de plus de trois composants [9, 40, 47] et peut être utilisé par exemple pour l'étude des systèmes avec changement de phase. Cependant, pour des phases non miscibles, l'utilisation de l'approche générale ne suffit pas (propriétés de consistance non vérifiées). En effet, l'analyse proposée pour avoir un modèle consistant semble difficile à utiliser directement : par exemple pour 4 phases, il y a 6 tensions de surface différentes et seulement 4 coefficients Σ_i .

I.3.2 Premiers exemples pour le potentiel de Cahn-Hilliard

Dans différents travaux de la littérature [47, 69, 70], le potentiel de Cahn-Hilliard F , dans le cadre triphasique, est défini par

$$F(\mathbf{c}) = \tilde{F}_0(\mathbf{c}) \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2. \quad (\text{I.38})$$

Le modèle décrit par Kim *et al.* [69, 70] est basé sur une approche différente de la nôtre. En effet, l'élimination d'un des paramètres d'ordre (par exemple $c_3 = 1 - c_1 - c_2$) est faite avant l'établissement des équations. En supposant que toutes les tensions de surface valent 1 et que la mobilité est constante égale à 1, le système proposé dans [69] s'écrit

$$\begin{cases} \frac{\partial c_1}{\partial t} = \Delta \mu_1, \\ \mu_1 = \frac{\partial \bar{F}}{\partial c_1}(c_1, c_2) - \varepsilon^2 \Delta c_1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta c_2, \\ \frac{\partial c_2}{\partial t} = \Delta \mu_2, \\ \mu_2 = \frac{\partial \bar{F}}{\partial c_2}(c_1, c_2) - \varepsilon^2 \Delta c_2 - \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta c_1, \end{cases} \quad (\text{I.39})$$

$$\text{où } \bar{F}(c_1, c_2) = \tilde{F}_0(\mathbf{c})(c_1, c_2, 1 - c_1 - c_2) = \frac{1}{4} (c_1^2c_2^2 + c_2^2(1 - c_1 - c_2)^2 + (1 - c_1 - c_2)^2c_1^2).$$

On remarque dans ce modèle que si $c_3 = 0$, le système ne satisfait pas $c_1 + c_2 = 1$. En effet, l'équation vérifiée par $c_1 + c_2$ est la suivante

$$\frac{\partial}{\partial t}(c_1 + c_2) = \Delta \left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial c_1}(c_1, c_2) + \frac{\partial \bar{F}}{\partial c_2}(c_1, c_2) - \frac{3\varepsilon^2}{2}\Delta(c_1 + c_2) \right)$$

et 1 n'est pas solution puisque la somme des termes non-linéaires $\frac{\partial \bar{F}}{\partial c_1}(c_1, c_2) + \frac{\partial \bar{F}}{\partial c_2}(c_1, c_2)$ n'est pas constante à l'interface entre les phases 1 et 2.

D'après le théorème I.3.9, le potentiel \tilde{F}_0 ne permet pas d'avoir un modèle algébriquement consistant avec les systèmes diphasiques $S_{\sigma_{ij}}^{diph}$ sous-jacents. Ces modèles ne sont pas adaptés pour la description de mélanges à trois constituants non-miscibles (des exemples numériques sont donnés dans le paragraphe suivant).

D'après le théorème I.3.9, la forme la plus simple admissible pour avoir un modèle consistant est le polynôme suivant

$$\begin{aligned} F_0(\mathbf{c}) &\stackrel{\text{def}}{=} \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 + c_1c_2c_3(\Sigma_1c_1 + \Sigma_2c_2 + \Sigma_3c_3) \\ &= \frac{\Sigma_1}{2}c_1^2(c_2 + c_3)^2 + \frac{\Sigma_2}{2}c_2^2(c_1 + c_3)^2 + \frac{\Sigma_3}{2}c_3^2(c_1 + c_2)^2, \end{aligned} \quad (\text{I.40})$$

les coefficients $(\Sigma_i)_i$ étant définis par (I.25). En se limitant aux valeurs de \mathbf{c} appartenant à l'hyperplan \mathcal{S} , la fonction F_0 peut s'écrire aussi sous la forme

$$F_0(\mathbf{c}) = \frac{\Sigma_1}{2}c_1^2(1 - c_1)^2 + \frac{\Sigma_2}{2}c_2^2(1 - c_2)^2 + \frac{\Sigma_3}{2}c_3^2(1 - c_3)^2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}. \quad (\text{I.41})$$

Cette fonction dépend seulement et explicitement des paramètres physiques σ_{12}, σ_{13} et σ_{23} . Ceci est un avantage pour cette approche, comparée à d'autres modèles de la littérature où une calibration est nécessaire pour déterminer les paramètres du modèle (*e.g.* [47]).

I.3.3 Modèle consistant et non-consistant

Nous comparons ici les modèles obtenus pour les potentiels \tilde{F}_0 et F_0 , définis par (I.38) et (I.40), en s'intéressant tout d'abord à leur graphe puis aux résultats obtenus numériquement lors de la simulation de l'étalement d'une bulle entre deux phases stratifiées.

On visualise tout d'abord les isovaleurs de la fonction F en coordonnées barycentriques afin d'observer les différences entre les potentiels F_0 et \tilde{F}_0 . Plus précisément, on représente le triangle de Gibbs dont les sommets représentent les trois phases pures $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ et $(0, 0, 1)$. Les points situés à l'intérieur du triangle de Gibbs correspondent aux valeurs des concentrations physiquement admissibles.

Sur la figure I.2, on compare les différences entre les fonctions \tilde{F}_0 et F_0 pour lesquelles le modèle (I.10) est respectivement non consistant et consistant. On se place dans le cas où les trois tensions de surface sont identiques (figures I.2(a) et I.2(b)). Dans le cas non consistant, au centre du triangle de Gibbs, on observe un point-selle pour F tandis que dans le cas consistant, on observe un maximum local. De plus, dans le cas où $F = F_0$ (modèle consistant), le chemin d'énergie minimale entre deux sommets du triangle de Gibbs est exactement le côté du triangle. Comme l'évolution du système est menée par la minimisation de l'énergie libre totale, la structure de $F = \tilde{F}_0$ entraîne l'apparition artificielle d'une des phases dans l'interface des deux autres. Sur la figure I.2(c), le profil de F_0 a toujours la même structure (avec un maximum local à l'intérieur de triangle de Gibbs) pour trois tensions de surface différentes.

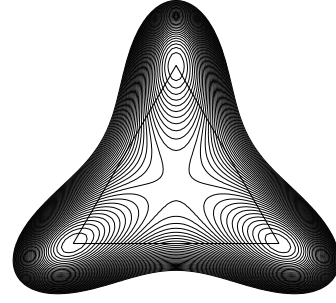
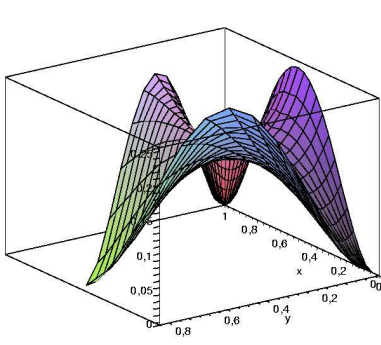
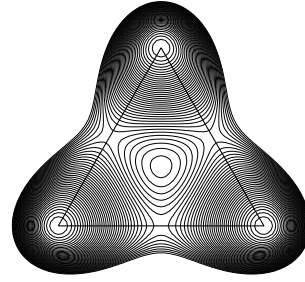
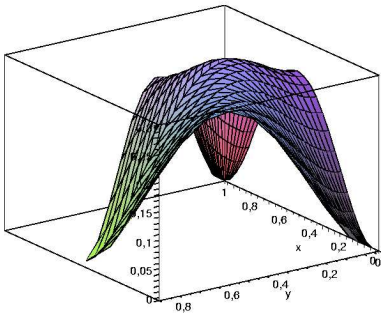
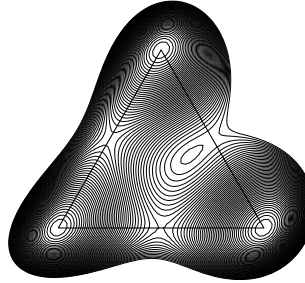
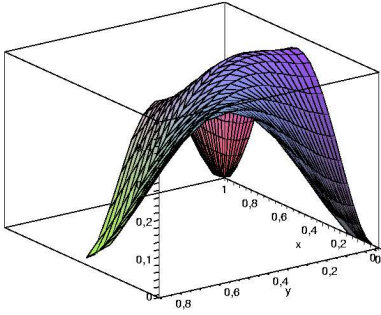

 (a) $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 4$, $F = \tilde{F}_0$, modèle non consistant

 (b) $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 4$, $F = F_0$, modèle consistant

 (c) $\Sigma_1 = 6, \Sigma_2 = 8, \Sigma_3 = 4$, $F = F_0$, modèle consistant

 FIG. I.2 – Graphe et isovaleurs des fonctions \tilde{F}_0 et F_0 en coordonnées barycentriques

On s'intéresse maintenant à la simulation de l'étalement d'une lentille entre deux phases liquides stratifiées. À l'équilibre, la forme de la lentille et les angles de contact entre les phases sont connus analytiquement (figure I.3). Une étude plus détaillée de ce problème sera donnée dans le chapitre IV .

On se place dans le cas où les trois tensions de surface sont égales à 1. La figure I.4 montre le résultat obtenu à l'équilibre pour $F = F_0$. La zone blanche correspond à la zone interfaciale (points où $(1 - c_1)(1 - c_2)(1 - c_3) > \frac{3}{16}$) et la ligne noire correspond à la position de l'interface de la solution analytique.

Relation de Young :

$$\frac{\sin \theta_1}{\sigma_{23}} = \frac{\sin \theta_2}{\sigma_{13}} = \frac{\sin \theta_3}{\sigma_{12}}$$

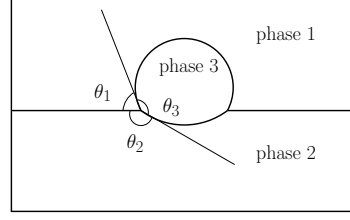


FIG. I.3 – Forme théorique de la lentille à l'équilibre

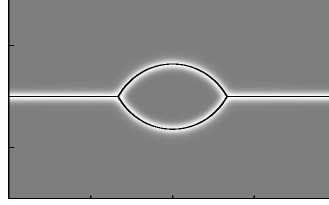


FIG. I.4 – Etat d'équilibre obtenu en prenant $F = F_0$ avec $(\sigma_{12}; \sigma_{13}; \sigma_{23}) = (1; 1; 1)$

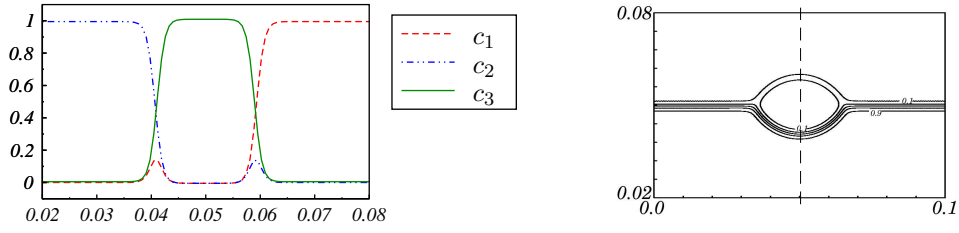
Nous comparons ici les résultats obtenus avec le modèle (I.10) en utilisant comme potentiel de Cahn-Hilliard $F = F_0$ et $F = \tilde{F}_0$ ainsi qu'avec le modèle (I.39) décrit dans [70]. Sur la figure I.5, le modèle algébriquement consistant donne des résultats corrects au niveau des interfaces, par rapport aux deux autres modèles où on observe l'apparition artificielle de la phase i dans l'interface entre les phases j et k . Ce résultat est cohérent avec l'analyse du paragraphe I.3.1, puisque la fonction \tilde{F}_0 ne permet pas de vérifier la propriété **(P2)**. Ce comportement a déjà été observé, sans être expliqué, dans [70, Fig. 4.5] et persiste lorsqu'on raffine le maillage (figure I.6) car il ne s'agit pas d'un artefact numérique.

Le modèle (I.10) avec $F = F_0$ donne des résultats satisfaisants. Cependant, le modèle a des limites. En effet, dans les situations d'étalement total, c'est-à-dire lorsqu'un des coefficients Σ_i est négatif, l'hypothèse (I.17) n'est jamais satisfaite. Prenons par exemple Σ_1 négatif, alors

$$F_0(-1, 1, 1) = 2\Sigma_1 < 0.$$

Le triplet $(-1, 1, 1)$ n'a pas de sens physique mais nous avons vu précédemment que le système de Cahn-Hilliard non dégénéré avec un potentiel régulier ne permet pas d'assurer que les concentrations restent positives (remarque I.1.1). En fait, même quand la condition (I.14) est vérifiée, F_0 peut ne pas être minorée sur l'hyperplan \mathcal{S} (par exemple, si $\Sigma_1 = \Sigma_2 = 1$ et $\Sigma_3 = -0.2$). Dans ce cas, le théorème I.2.7 ne s'applique pas et le système (I.10) obtenu est mal posé. Numériquement, on observe que les simulations s'arrêtent car les valeurs des paramètres d'ordre ne restent pas bornées (§I.3.5).

C'est pourquoi, nous allons considérer un choix de F plus général, i.e. d'ordre plus élevé, afin d'avoir un problème bien posé.



Modèle (I.39) proposé dans [70] : cas non-consistant

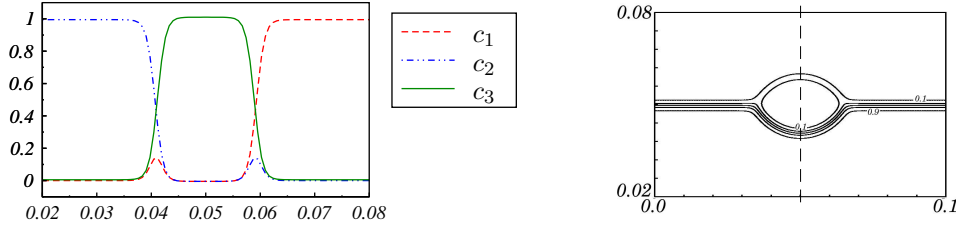
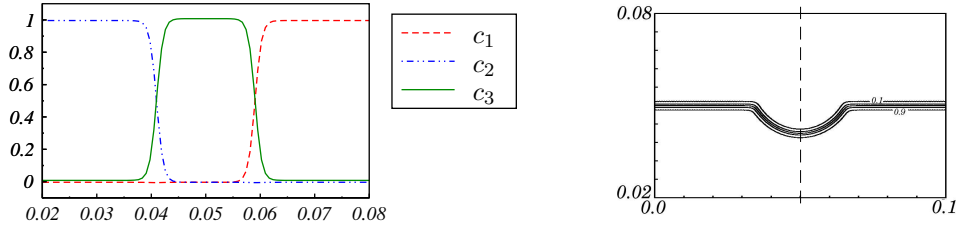

 Modèle (I.10) avec $F = \tilde{F}_0$: cas non-consistant

 Modèle (I.10) avec $F = F_0$: cas consistant

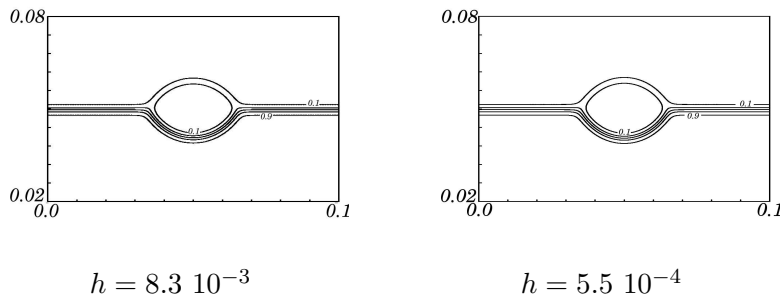
 FIG. I.5 – Coupe verticale des paramètres d'ordre en $x = 0.05$ pour $(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}) = (1; 1; 1)$ et isovalues de c_2 pour les niveaux $c_2 = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ pour trois modèles différents

 $h = 8.3 \cdot 10^{-3}$
 $h = 5.5 \cdot 10^{-4}$

 FIG. I.6 – Isovalues de c_2 pour les niveaux $c_2 = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ pour le modèle (I.10) avec $F = \tilde{F}_0$ pour deux maillages différents

I.3.4 Potentiel de Cahn-Hilliard F d'ordre plus élevé

Comme nous avons vu précédemment, si un des coefficients Σ_i est négatif, il est nécessaire de considérer des énergies de volume plus complexes admissibles d'après le théorème I.3.9 (pour préserver la consistance algébrique du système) et qui vérifient les hypothèses du théorème I.2.7 afin d'avoir un problème bien posé. Dans la suite, on s'intéressera au cas particulier suivant

$$F_{\Lambda,\alpha}(\mathbf{c}) = F_0(\mathbf{c}) + \Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2 (\varphi_\alpha(c_1) + \varphi_\alpha(c_2) + \varphi_\alpha(c_3)), \quad (\text{I.42})$$

où Λ est un paramètre réel positif et φ_α est la fonction définie par

$$\varphi_\alpha : x \mapsto \frac{1}{(1+x^2)^\alpha}$$

avec $\alpha \geq 0$. Quand $\Lambda = 0$, on retrouve la fonction F_0 introduite précédemment. Si on prend $\alpha = 0$, la fonction $F_{\Lambda,0}$ est le polynôme d'ordre 6 suivant

$$F_{\Lambda,0}(\mathbf{c}) = F_0(\mathbf{c}) + 3\Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2. \quad (\text{I.43})$$

Le modèle (I.10) avec $F = F_{\Lambda,0}$ sera utilisé pour les tests numériques. Malheureusement, notre analyse ne s'applique pas en 3D pour le cas limite $\alpha = 0$.

I.3.4.a Problème bien posé

Dans ce paragraphe, nous allons montrer que le problème (I.10) avec $F = F_{\Lambda,\alpha}$ est bien posé sous certaines hypothèses sur Λ et α . Pour cela, on a besoin de quelques résultats sur les fonctions φ_α et $\Phi_\alpha(x) = x^2 \varphi_\alpha(x)$.

Lemme I.3.13

1. Pour tout $\alpha \geq 0$, il existe $K_\alpha > 0$ tel que

$$\varphi_\alpha(x) \leq \frac{K_\alpha}{|x|^{2\alpha}}, \quad |\varphi'_\alpha(x)| \leq \frac{K_\alpha}{|x|^{2\alpha+1}}, \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

$$\left| x - \frac{1}{2} \Phi'_\alpha(x) \right| \leq K_\alpha \frac{|x|^3}{1+x^2} \leq \frac{K_\alpha}{2} |x|^2, \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

2. On a

$$\Phi_\alpha \text{ est convexe, pour tout } \alpha \in \left[0, \frac{8}{17}\right],$$

$$x \Phi'_\alpha(x) \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \text{ pour tout } \alpha \in [0, 1]. \quad (\text{I.44})$$

La preuve du lemme est donnée dans l'annexe B.

On suppose dans la suite que

$$\begin{cases} \alpha \in [0, 1], & \text{si } d = 2, \\ \alpha \in \left]0, \frac{8}{17}\right], & \text{si } d = 3. \end{cases} \quad (\text{I.45})$$

Théorème I.3.14

Si $\Lambda > 0$ et α vérifie la condition (I.45), alors le système (I.10) avec $F = F_{\Lambda,\alpha}$ est bien posé pour toutes valeurs de $(\Sigma_i)_i$ vérifiant les conditions (I.14)-(I.15).

Preuve.

Pour montrer ce résultat, il suffit de vérifier que les hypothèses du théorème I.2.7 sont satisfaites.

 1. *Croissance polynômiale :*

D'après le lemme I.3.13, on vérifie que pour tous Λ et α positifs, il existe $B_1, B_2 > 0$ telles que

$$|F_{\Lambda,\alpha}(\mathbf{c})| \leq B_1 |\mathbf{c}|^{6-2\alpha} + B_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}, \quad (\text{I.46})$$

$$|DF_{\Lambda,\alpha}(\mathbf{c})| \leq B_1 |\mathbf{c}|^{5-2\alpha} + B_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}, \quad (\text{I.47})$$

$$|D^2 F_{\Lambda,\alpha}(\mathbf{c})| \leq B_1 |\mathbf{c}|^4 + B_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}. \quad (\text{I.48})$$

Ainsi, les hypothèses de croissance polynômiale de F (I.18)-(I.20) sont satisfaites, pour $d = 2$ et $d = 3$. À noter que l'exposant 4 dans le membre de droite de (I.48) ne peut pas être amélioré (voir le calcul (I.49)).

 2. *Minoration de la matrice hessienne de F :*

En utilisant (I.48), l'hypothèse (I.21)

$$(D^2 F(\mathbf{c})\xi, \xi) \geq -D_1 (1 + |\mathbf{c}|^q) |\xi|^2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}, \forall \xi \in \mathbb{R}^3,$$

est satisfaite, avec $q = 4$, par $F_{\Lambda,\alpha}$ pour tout $\Lambda \geq 0$ et pour tout $\alpha \geq 0$. Malheureusement, dans le cas 3D, nous avons absolument besoin que $q < 4$ pour démontrer l'unicité des solutions faibles dans le théorème I.2.7.

Dans l'expression de $F_{\Lambda,\alpha}$, tous les termes de F_0 sont d'ordre 4 et contribuent dans $D^2 F_{\Lambda,\alpha}$ seulement avec des termes d'ordre 2. On s'intéresse donc aux termes additionnels dans $F_{\Lambda,\alpha}$, c'est-à-dire par exemple $G(\mathbf{c}) = \Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2 \varphi_\alpha(c_1) = \Lambda \Phi_\alpha(c_1) c_2^2 c_3^2$. En utilisant le lemme I.3.13, il vient

$$|\partial_i \partial_j G(\mathbf{c})| \leq K |\mathbf{c}|^{4-2\alpha},$$

dès que $(i, j) \neq (1, 1)$. Par conséquent, ces termes contribuent dans l'inégalité (I.21) avec une puissance $q = 4 - 2\alpha < 4$ grâce à l'hypothèse (I.45) sur α pour $d = 3$. Il reste à considérer le terme

$$\partial_1^2 G(\mathbf{c}) = \Phi_\alpha''(c_1) c_2^2 c_3^2, \quad (\text{I.49})$$

qui est d'ordre 4. Néanmoins, comme α satisfait (I.45), d'après le lemme I.3.13, Φ_α est une fonction convexe et en particulier, ce terme $\partial_1^2 G(\mathbf{c})$ est positif. Finalement, sa contribution dans $(D^2 F_{\Lambda,\alpha} \xi, \xi)$ est $\partial_1^2 G |\xi_1|^2$ qui est positif. Ceci prouve que l'hypothèse (I.21) est satisfaite par $F_{\Lambda,\alpha}$ avec $q = 4 - 2\alpha$.

En dimension 3, on a utilisé la propriété de convexité de Φ_α pour tout $\alpha \in \left[0, \frac{8}{17}\right]$ (annexe B) et le fait que $q = 4 - 2\alpha < 4$, c'est pourquoi on suppose $\alpha \in \left]0, \frac{8}{17}\right[$.

 3. *Minoration de F :*

Tout d'abord, en utilisant les définitions (I.41) de F_0 et (I.42) de $F_{\Lambda,\alpha}$, il est clair que $F_{\Lambda,\alpha}$ est positive sur \mathcal{S} pour tout $\Lambda \geq 0$ et pour tout $\alpha \geq 0$ dès que tous les coefficients $(\Sigma_i)_i$ sont positifs. Par contre si l'un des coefficients Σ_i est négatif, nous avons le résultat suivant.

Proposition I.3.15

Soient σ_{12} , σ_{13} et σ_{23} , trois réels positifs et Σ_1, Σ_2 et Σ_3 définis par (I.25). Pour tout α vérifiant (I.45) et tout $\Lambda > 0$, le potentiel de Cahn-Hilliard $F_{\Lambda, \alpha}$ défini par (I.40) et (I.42) est minoré sur l'hyperplan \mathcal{S} et vérifie

$$\lim_{\Lambda \rightarrow +\infty} \left(\inf_{\mathcal{S}} F_{\Lambda, \alpha} \right) = 0. \quad (\text{I.50})$$

En particulier, (I.50) montre que le terme additionnel d'ordre élevé dans $F_{\Lambda, \alpha}$ agit comme un terme stabilisant qui tend vers un cas idéal où l'énergie de mélange est positive quand Λ tend vers l'infini.

Ainsi, en utilisant la proposition I.3.15, on a que la fonction $F_{\Lambda, \alpha}$ est minorée dès que $\Lambda > 0$ ce qui termine la preuve du théorème I.3.14

■

Nous donnons maintenant la preuve de la proposition I.3.15.

Preuve.

On suppose par exemple que $\Sigma_1 < 0$. Comme tous les coefficients σ_{ij} sont positifs, on déduit des relations (I.27), c'est-à-dire

$$\Sigma_i + \Sigma_j = 2\sigma_{ij} > 0$$

que nécessairement $\Sigma_2 > 0$ et $\Sigma_3 > 0$.

1/ En utilisant la définition de F_0 (I.40), on a pour tout $\mathbf{c} \in \mathcal{S}$

$$\begin{aligned} F_{\Lambda, \alpha}(\mathbf{c}) &\geq -\frac{|\Sigma_1|}{2} c_1^2 (c_2 + c_3)^2 + \Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2 (\varphi_\alpha(c_1) + \varphi_\alpha(c_2) + \varphi_\alpha(c_3)) \\ &\geq -\frac{|\Sigma_1|}{2} c_1^2 (c_2 + c_3)^2 + \Lambda c_1^2 (\Phi_\alpha(c_2) c_3^2 + \Phi_\alpha(c_3) c_2^2). \end{aligned}$$

On pose

$$M_{\Lambda, \alpha} = \Phi_\alpha^{-1} \left(\frac{|\Sigma_1|}{\Lambda} \right). \quad (\text{I.51})$$

On considère tout d'abord $\mathbf{c} \in \mathcal{S}$ tel que $|c_2| \geq M_{\Lambda, \alpha}$ et $|c_3| \geq M_{\Lambda, \alpha}$. Par conséquent, il vient

$$\begin{aligned} F_{\Lambda, \alpha}(\mathbf{c}) &\geq -\frac{|\Sigma_1|}{2} c_1^2 (c_2 + c_3)^2 + \Lambda \Phi_\alpha(M_{\Lambda, \alpha}) c_1^2 (c_3^2 + c_2^2) \\ &\geq -\frac{|\Sigma_1|}{2} c_1^2 (c_2 + c_3)^2 + \frac{\Lambda}{2} \Phi_\alpha(M_{\Lambda, \alpha}) c_1^2 (c_2 + c_3)^2 = 0, \end{aligned}$$

d'après la définition de $M_{\Lambda, \alpha}$. Ainsi, on a montré que $F_{\Lambda, \alpha}(\mathbf{c})$ est positive dès que $\mathbf{c} \in \mathcal{S}$ avec $|c_2| \geq M_{\Lambda, \alpha}$ et $|c_3| \geq M_{\Lambda, \alpha}$.

2/ On considère maintenant $\mathbf{c} \in \mathcal{S}$ tel que $|c_2| \leq M_{\Lambda, \alpha}$, par exemple. La même étude peut être faite pour $|c_3| \leq M_{\Lambda, \alpha}$. En utilisant l'expression (I.41) de F_0 et comme $\Lambda > 0$ et $\Sigma_2 > 0$, on a

$$F_{\Lambda, \alpha}(\mathbf{c}) \geq \frac{\Sigma_1}{2} c_1^2 (1 - c_1)^2 + \frac{\Sigma_3}{2} (1 - c_1 - c_2)^2 (c_1 + c_2)^2.$$

Si on note $G(c_1, c_2)$ le second membre de cette inégalité, on peut écrire

$$G(c_1, c_2) = \frac{\Sigma_1}{2} c_1^2 (1 - c_1)^2 + \frac{\Sigma_3}{2} c_1^2 (1 - c_1)^2 + \frac{\Sigma_3}{2} H(c_1, c_2), \quad (\text{I.52})$$

avec

$$H(c_1, c_2) = c_2 \left((1 - c_1)^2 (2c_1 + c_2) - 2(1 - c_1)(c_1 + c_2)^2 + c_2(c_1 + c_2)^2 \right).$$

En utilisant que $|c_2|$ est bornée par $M_{\Lambda, \alpha}$, il vient

$$\left| \frac{\Sigma_3}{2} H(c_1, c_2) \right| \leq K M_{\Lambda, \alpha} (1 + M_{\Lambda, \alpha}^3) (1 + |c_1|^3)$$

où K dépend seulement de $|\Sigma_3|$. En appliquant l'inégalité de Young, on a alors pour tout $0 < \delta < 1$

$$\left| \frac{\Sigma_3}{2} H(c_1, c_2) \right| \leq K M_{\Lambda, \alpha} (1 + M_{\Lambda, \alpha}^3) + \frac{\delta \sigma_{13}}{2} c_1^4 + \frac{K}{\delta^3} M_{\Lambda, \alpha}^4 (1 + M_{\Lambda, \alpha}^{12}).$$

Puis, on utilise le résultat suivant dont la preuve est donnée dans l'annexe B.

Lemme I.3.16

Pour tout $0 < \delta < 1$, on a

$$x^2(1 - x)^2 \geq \frac{\delta}{2} x^4 - \frac{1}{2} \frac{\delta}{(1 - \delta)^2}, \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

Ainsi de la définition (I.52) de G , il vient

$$\begin{aligned} G(c_1, c_2) &\geq \sigma_{13} c_1^2 (1 - c_1)^2 - \left| \frac{\Sigma_3}{2} H(c_1, c_2) \right| \\ &\geq -K M_{\Lambda, \alpha} (1 + M_{\Lambda, \alpha}^3) - \frac{K}{\delta^3} M_{\Lambda, \alpha}^4 (1 + M_{\Lambda, \alpha}^{12}) - \frac{1}{2} \frac{\delta \sigma_{13}}{(1 - \delta)^2}, \end{aligned}$$

ce qui prouve que G (et donc aussi $F_{\Lambda, \alpha}$) est minorée pour ces valeurs de \mathbf{c} . Ainsi la première partie de la proposition est démontrée.

Finalement, pour Λ assez grand, on peut voir que $M_{\Lambda, \alpha}$, défini par (I.51), est plus petit que 1, et donc on peut prendre $\delta = M_{\Lambda, \alpha}$ dans l'inégalité précédente ce qui implique

$$\inf_{\mathcal{S}} F_{\Lambda, \alpha}(\mathbf{c}) \geq -K M_{\Lambda, \alpha} (1 + M_{\Lambda, \alpha}^3) - K M_{\Lambda, \alpha} (1 + M_{\Lambda, \alpha}^{12}) - \frac{1}{2} \frac{M_{\Lambda, \alpha} \sigma_{13}}{(1 - M_{\Lambda, \alpha})^2}. \quad (\text{I.53})$$

Le membre de droite de (I.53) tend vers 0 quand Λ tend vers l'infini puisque on a $\lim_{\Lambda \rightarrow +\infty} M_{\Lambda, \alpha} = 0$. ■

I.3.4.b Positivité de $F_{\Lambda, \alpha}$

On montre ici une propriété supplémentaire sur la fonction $F_{\Lambda, \alpha}$. Sous des conditions convenables et pour Λ assez grand, le potentiel de Cahn-Hilliard $F_{\Lambda, \alpha}$ est positif et les triplets $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ et $(0, 0, 1)$ sont les seuls points où la fonction est minimale de valeur 0 sur \mathcal{S} . On a donc bien un potentiel en "triple puits".

Proposition I.3.17

Soit α vérifiant (I.45). Il existe $\Lambda_0 > 0$ tel que

$$\inf_{\mathcal{S}} F_{\Lambda, \alpha} = 0$$

pour tout $\Lambda \geq \Lambda_0$ si et seulement si on a

$$\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3 > 0. \quad (\text{I.54})$$

A noter que l'on retrouve la condition (I.14) sur les coefficients de capillarité Σ_i .

Preuve.

1/ Tout d'abord, si la condition (I.54) n'est pas satisfaite alors $\inf_{\mathcal{S}} F_{\Lambda, \alpha} < 0$ pour tout $\Lambda \geq 0$. En effet, supposons tout d'abord que

$$\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3 < 0.$$

Ceci implique en reprenant la preuve de la proposition I.2.3, que la matrice \mathbf{Q}

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 + \Sigma_3 & \Sigma_3 & 0 \\ \Sigma_3 & \Sigma_2 + \Sigma_3 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_2 + \Sigma_3 \end{pmatrix}.$$

a une valeur propre négative. De plus, comme \mathbf{Q} est diagonale par bloc, le vecteur propre associé à cette valeur propre est de la forme $(a, b, 0)$. Ainsi, il existe $(a, b) \neq (0, 0)$ tels que

$$\Sigma_1 a^2 + \Sigma_2 b^2 + \Sigma_3 (a + b)^2 < 0.$$

On a alors pour tout α et pour tout Λ

$$F_{\Lambda, \alpha}(ax, bx, 1 - (ax + bx)) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} (\Sigma_1 a^2 + \Sigma_2 b^2 + \Sigma_3 (a + b)^2) x^2,$$

et donc $F_{\Lambda, \alpha}$ prend des valeurs négatives sur \mathcal{S} dans un voisinage de $(0, 0, 1)$.

On suppose maintenant que

$$\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3 = 0. \quad (\text{I.55})$$

Tout d'abord, si par exemple on a $\Sigma_1 = 0$, alors (I.55) implique $\Sigma_2 \Sigma_3 = 0$ c'est-à-dire un autre coefficient Σ_j est nul ce qui n'est pas possible puisque la somme de deux coefficients Σ_i doit être strictement positive. On peut donc supposer par exemple

$$\Sigma_1 > 0, \quad \Sigma_2 > 0, \quad \text{et} \quad \Sigma_3 < 0.$$

Comme précédemment, on déduit de (I.55) que 0 est valeur propre de la matrice \mathbf{Q} et donc il existe $a \neq 0$ et $b \neq 0$ tels que

$$\Sigma_1 a^2 + \Sigma_2 b^2 + \Sigma_3 (a + b)^2 = 0. \quad (\text{I.56})$$

Ainsi, on a

$$F_{\Lambda, \alpha}(ax, bx, 1 - (ax + bx)) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} -2x^3 (\Sigma_1 a^3 + \Sigma_2 b^3 + \Sigma_3 (a + b)^3)$$

(développement jusqu'au terme d'ordre 3 puisque celui d'ordre 2 est nul au voisinage de 0). Si le facteur de x^3 est non nul alors on conclut que $F_{\Lambda, \alpha}$ prend des valeurs négatives. Raisonnons par l'absurde, et supposons que

$$\Sigma_1 a^3 + \Sigma_2 b^3 + \Sigma_3 (a + b)^3 = 0. \quad (\text{I.57})$$

En multipliant (I.56) par $(a + b)$ et en soustrayant (I.57), il vient

$$ab(\Sigma_1 a + \Sigma_2 b) = 0,$$

et comme $a \neq 0$ et $b \neq 0$, on a

$$\Sigma_1 a + \Sigma_2 b = 0.$$

Comme on suppose que Σ_1 et Σ_2 sont strictement positifs, alors a et b sont de signes contraires et $ab < 0$. Finalement, dans (I.56), on trouve

$$(\Sigma_1 + \Sigma_3)a^2 + (\Sigma_2 + \Sigma_3)b^2 + 2\Sigma_3 ab = 0$$

ce qui n'est pas possible car tous les termes sont strictement positifs.

2/ On suppose maintenant que (I.54) est vérifiée. On veut montrer que la fonction $H_{\Lambda,\alpha}$ définie par

$$H_{\Lambda,\alpha}(c_1, c_2) = F_{\Lambda,\alpha}(c_1, c_2, 1 - c_1 - c_2)$$

est positive pour Λ assez grand. Pour tout $(c_1, c_2) \in \mathbb{R}^2$, on ne peut pas avoir simultanément

$$|c_1| < \frac{1}{4}, \quad |c_2| < \frac{1}{4}, \quad |1 - c_1 - c_2| < \frac{1}{4}.$$

On suppose par exemple que $|1 - c_1 - c_2| \geq \frac{1}{4}$, les deux autres cas peuvent être traités de la même manière. En utilisant le corollaire I.2.4 avec

$$\xi_1 = c_1(1 - c_1), \quad \xi_2 = c_2(1 - c_2), \quad \xi_3 = -(c_1 + c_2)(1 - c_1 - c_2),$$

et l'expression de $F_{\Lambda,\alpha}$ (I.42), on a

$$\begin{aligned} H_{\Lambda,\alpha}(c_1, c_2) &= \frac{1}{2}\Sigma_1[c_1(1 - c_1)]^2 + \frac{1}{2}\Sigma_2[c_2(1 - c_2)]^2 + \frac{1}{2}\Sigma_3[(c_1 + c_2)(1 - c_1 - c_2)]^2 \\ &\quad + \Lambda c_1^2 c_2^2 (1 - c_1 - c_2)^2 (\varphi_\alpha(c_1) + \varphi_\alpha(c_2) + \varphi_\alpha(1 - c_1 - c_2)) \\ &\geq -\frac{1}{2}\bar{\Sigma}[c_1(1 - c_1) + c_2(1 - c_2) - (c_1 + c_2)(1 - c_1 - c_2)]^2 \\ &\quad + \Lambda c_1^2 c_2^2 \Phi_\alpha(1 - c_1 - c_2). \end{aligned}$$

Un calcul direct montre que le premier terme est égal à $-\frac{1}{2}\bar{\Sigma}(2c_1c_2)^2$. Comme $|1 - c_1 - c_2| \geq \frac{1}{4}$, on a alors $\Phi_\alpha(1 - c_1 - c_2) \geq \Phi_\alpha(\frac{1}{4})$ grâce à (I.44). D'où, on en déduit

$$H_{\Lambda,\alpha}(c_1, c_2) \geq -2\bar{\Sigma}c_1^2c_2^2 + \Lambda c_1^2c_2^2\Phi_\alpha\left(\frac{1}{4}\right),$$

et le membre de droite de l'inégalité est positif pour tout $(c_1, c_2) \in \mathbb{R}^2$ dès que

$$\Lambda \geq \frac{2\bar{\Sigma}}{\Phi_\alpha\left(\frac{1}{4}\right)}.$$

■

La borne inférieure obtenue pour Λ dans la preuve peut se calculer explicitement mais n'est probablement pas optimale.

I.3.4.c Comparaison entre les potentiels de Cahn-Hilliard F_0 et $F_{\Lambda,0}$

Pour comparer les modèles obtenus avec F_0 et $F_{\Lambda,0}$, on s'intéresse tout d'abord aux isovaleurs de ces fonctions dans le triangle de Gibbs lorsqu'un des coefficients Σ_i est négatif. Nous regarderons ensuite les conséquences lors de la simulation numérique d'un étalement total d'une bulle entre deux phases stratifiées.

Sur la figure I.7, on visualise les graphes des fonctions F_0 et $F_{\Lambda,0}$. Pour des très petites valeurs de Λ , les fonctions F_0 et $F_{\Lambda,0}$ prennent des valeurs négatives (zone gris clair sur le dessin). Le système n'a donc pas un comportement correct puisqu'il essaie d'atteindre le minimum global négatif de l'énergie. Si on augmente Λ , par exemple $\Lambda = 0.7$, on voit que $F_{\Lambda,0}$ est positive mais a plusieurs minima locaux que le système peut essayer d'atteindre pour minimiser l'énergie. Enfin,

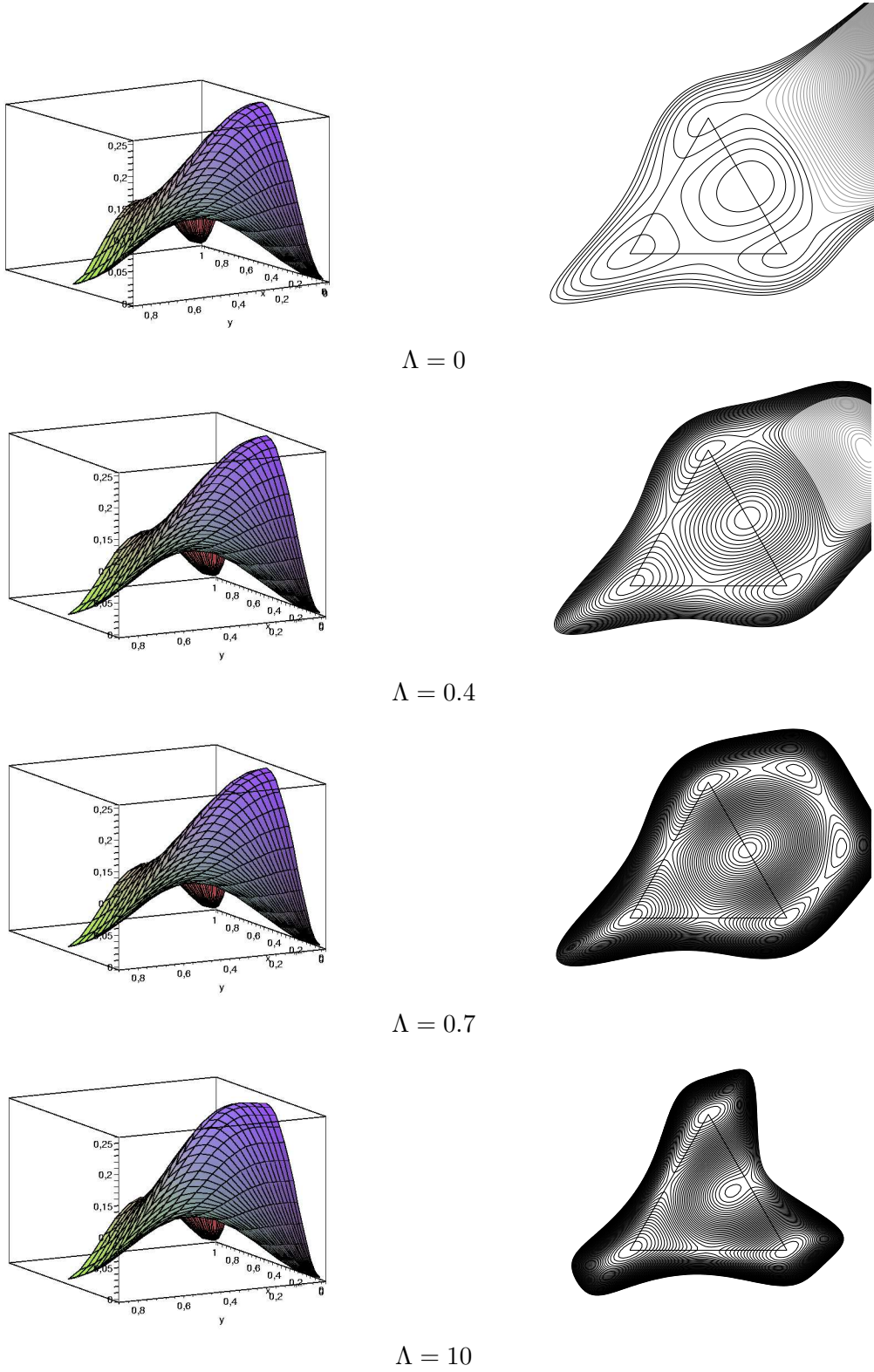


FIG. I.7 – Isovaleurs des fonctions F_0 et $F_{\Lambda,0}$ en coordonnées barycentriques en situation d'étalement total $\Sigma_1 = \Sigma_2 = 4, \Sigma_3 = -0.8$ pour différentes valeurs de Λ

pour Λ assez grand (figure I.7, $\Lambda = 10$), $F_{\Lambda,0}$ est positive et a seulement trois minima au sommet du triangle de Gibbs. De plus, on retrouve dans ce cas le même comportement que pour F_0 (figure I.2), c'est-à-dire un maximum local à l'intérieur du triangle.

On s'intéresse maintenant au cas de l'étalement total d'une bulle entre deux phases liquides stratifiées. Le coefficient Σ_i associé à la bulle est négatif, et on utilise $F = F_{\Lambda,0}$. La bulle s'étale peu à peu entre les deux autres phases (figure I.8).

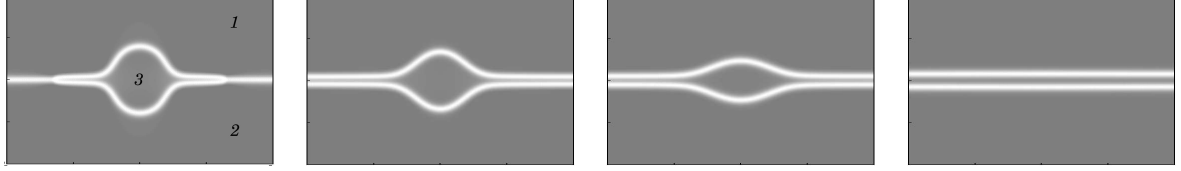


FIG. I.8 – Evolution en temps de l'étalement total d'une lentille où $(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}) = (3; 1; 1)$, en utilisant $F = F_{\Lambda,0}$, avec $\Lambda = 7$

L'utilisation de l'énergie volumique $F_{\Lambda,0}$ est fondamentale. En effet, si on prend $F = F_0$, dans ce cas l'énergie totale prend des valeurs négatives et alors le calcul s'arrête rapidement car les concentrations ne restent pas bornées. Nous comparons sur la figure I.9 les résultats obtenus au même instant (après quelques pas de temps et avant que le calcul ne s'arrête) dans les cas $F = F_0$ et $F = F_{\Lambda,0}$.

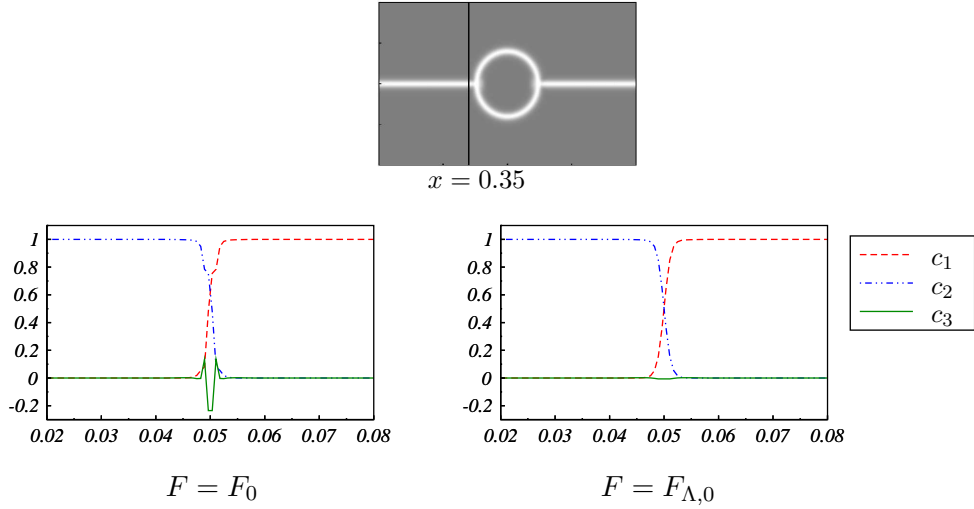


FIG. I.9 – Coupe verticale des paramètres d'ordre en $x = 0.035$ pour $(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}) = (3; 1; 1)$

I.3.4.d Conclusions

Nous résumons ici les résultats obtenus dans l'étude précédente :

- Si tous les coefficients $(\Sigma_i)_i$ définis par (I.25) sont positifs alors, le problème (I.10) avec $F = F_{\Lambda,\alpha}$ est bien posé pour tout $\Lambda \geq 0$ et pour tout α vérifiant la condition (I.45). En particulier, le choix le plus simple $F = F_0$ est toujours acceptable. De plus, les trois états correspondant à des phases pures $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ et $(0, 0, 1)$ sont les uniques points où l'énergie de volume est minimale et les chemins d'énergie minimale entre deux des phases sont les côtés du triangle.

- Si un des coefficients Σ_i est négatif, alors F_0 n'est pas toujours minorée. Cependant, sous la condition (I.54), pour tout $\Lambda > 0$ et pour tout α vérifiant (I.45), le problème (I.10) avec $F = F_{\Lambda,\alpha}$ est bien posé.

De plus, toujours sous la condition (I.54), pour tout α vérifiant la condition (I.45), et pour $\Lambda > 0$ assez grand, l'énergie de mélange $F_{\Lambda,\alpha}$ est positive et a seulement trois minima aux points $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ et $(0, 0, 1)$.

I.3.5 Consistance dynamique du modèle

Nous avons construit un modèle qui assure la consistance algébrique avec les systèmes diphasiques. Ainsi pour tout $\Lambda \geq 0$, il existe des solutions exactes particulières au problème (I.10) de la forme $(c, 1 - c, 0)$ où c satisfait le problème de Cahn-Hilliard diphasique (I.2) avec la tension de surface correspondante. Nous allons montrer maintenant que le modèle est dynamiquement consistant dans le sens que ces solutions "diphasiques" particulières sont stables quand on perturbe la donnée initiale. Ce point est crucial pour les simulations puisqu'il assure que des erreurs numériques perturbant la donnée initiale "diphasique" décroissent exponentiellement en temps. De plus, dans les situations où les trois composants sont présents, la consistance dynamique entraîne plus de stabilité aux interfaces entre deux des composants.

Pour tout $f \in L^1(\Omega)$, on définit sa moyenne sur Ω par

$$m(f) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} f(x) dx.$$

On rappelle qu'on note $L_m^2(\Omega)$ (resp. $H_m^1(\Omega)$) l'espace composé par l'ensemble des fonctions de $L^2(\Omega)$ (resp. $H^1(\Omega)$) qui ont une moyenne nulle sur Ω . Grâce à l'inégalité de Poincaré, $c \mapsto |\nabla c|_{L^2}$ est une norme sur $H_m^1(\Omega)$ que l'on note $|\cdot|_1$. De plus, rappelons que pour tout $f \in L_m^2(\Omega)$, il existe une unique fonction $u \in H_m^1(\Omega)$ telle que

$$\begin{cases} -\Delta u = f, & \text{dans } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, & \text{sur } \Gamma. \end{cases}$$

On note cet unique élément $u = (-\Delta)^{-1}f$ et $|f|_{-1} = |(-\Delta)^{-1}f|_1 = ((-\Delta)^{-1}f, f)_{L^2}^{\frac{1}{2}}$ qui est une norme sur $L_m^2(\Omega)$. Enfin, on a la propriété d'interpolation suivante

$$|f|_{L^2} \leq |f|_{-1}^{\frac{1}{2}} |f|_1^{\frac{1}{2}}, \quad \forall f \in H_m^1(\Omega). \quad (\text{I.58})$$

Théorème I.3.18 (Consistance dynamique pour $F = F_{\Lambda,\alpha}$)

Soit α vérifiant la condition (I.45). Si on suppose que les conditions (I.14)-(I.15) et les hypothèses (I.17)-(I.21) sur F sont vérifiées et que la mobilité M_0 est constante alors il existe $\Lambda_1 > 0$ tel que pour tout $\Lambda \geq \Lambda_1$, les solutions diphasiques du système (I.10) sont stables au sens suivant :

Pour tout $\mathcal{K} > 0$, il existe $\delta, \gamma > 0$ tel que pour tout $\mathbf{c}^0 \in \mathbb{H}_S^1(\Omega)$ telle que $|\mathbf{c}^0|_{\mathbb{H}^1} \leq \mathcal{K}$, on a $|c_j^0|_{-1} \leq \delta$ et $m(c_j^0) = 0 \implies |c_j(t)|_{-1} \leq |c_j^0|_{-1} e^{-\gamma t}$, $\forall t > 0$. (I.59)

Une conséquence de ce théorème et de (I.58) est que si c_j^0 est assez petit et de moyenne nulle alors $c_j(t)$ tend vers zéro exponentiellement en temps dans tous les espaces $H^s(\Omega)$ avec $s < 1$.

On a un résultat similaire pour $F = F_0$.

Théorème I.3.19 (Consistance dynamique pour $F = F_0$)

Si Σ vérifie

$$\Sigma_i > \frac{\Sigma_T}{2} > 0, \quad \forall i = 1, 2, 3 \quad (\text{I.60})$$

le résultat du théorème I.3.18 reste vrai avec $\Lambda = 0$.

Ce dernier résultat montre que, sous l'hypothèse (I.60), le choix $F = F_0$ (le plus "simple" possible pour avoir un modèle algébriquement consistant) est bien posé et dynamiquement consistant. Pour illustrer ce résultat, un exemple numérique est donné où la condition (I.60) n'est pas satisfaite. On se place toujours dans le cas d'une bulle piégée entre deux phases stratifiées. Ici, on prend le triplet $(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}) = (1; 0.5; 0.55)$ de sorte que

$$\Sigma_3 = 0.05 < \frac{\Sigma_T}{2} \simeq 6.8 \cdot 10^{-2}.$$

Dans ce cas, le théorème I.3.19 ne s'applique pas et on ne sait pas si le modèle est dynamiquement consistant. Cependant, on observe sur la figure I.10 qu'il y a apparition artificielle de la phase représentée par c_3 dans l'interface entre les deux autres phases. Cette apparition est beaucoup moins importante que dans la figure I.5 illustrant la non-consistance algébrique. Ceci s'explique par le fait que le problème ici ne vient pas d'un défaut de construction du modèle (puisqu'il est algébriquement consistant) mais seulement d'une instabilité dynamique due aux erreurs numériques. Si on prend $F = F_{\Lambda,0}$ pour Λ assez grand, on peut appliquer le théorème I.3.18. On remarque sur la figure I.10 que les instabilités numériques disparaissent.

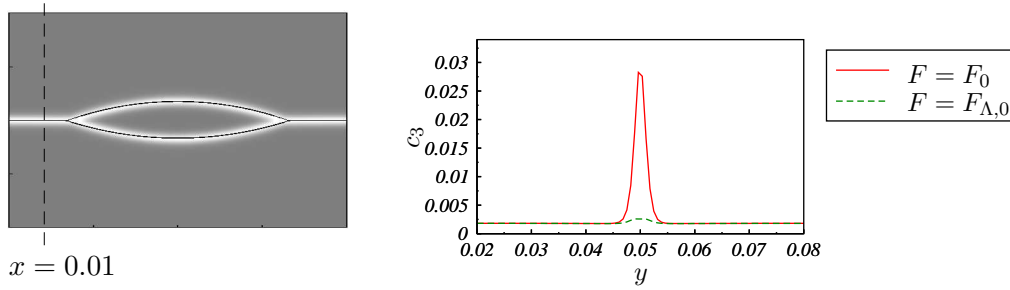


FIG. I.10 – Etat d'équilibre obtenu pour $(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}) = (1, 0.5, 0.55)$ et coupe verticale du paramètre d'ordre c_3 (correspondant à la bulle) en $x = 0.01$ pour $F = F_0$ et $F = F_{\Lambda,0}$

Nous donnons maintenant la preuve du théorème I.3.18 qui est valable en dimension 2 et 3. On utilisera en particulier des propriétés d'interpolation B.2.5 qui sont rappelées dans l'annexe B.

Preuve.

On suppose par exemple que $j = 1$. Comme $m(c_1^0) = 0$, on sait que $m(c_1(t)) = 0$ pour tout $t \geq 0$. L'équation vérifiée par c_1 est

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{M_0}{\Sigma_1} \Delta \mu_1. \quad (\text{I.61})$$

En appliquant l'opérateur $(-\Delta)^{-1}$ défini précédemment à (I.61), il vient

$$\frac{\partial (-\Delta)^{-1} c_1}{\partial t} = -\frac{M_0}{\Sigma_1} (\mu_1 - m(\mu_1)),$$

puis, en prenant le produit scalaire dans $L^2(\Omega)$ de cette équation avec $c_1(t)$ qui est à moyenne nulle, on obtient

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} ((-\Delta)^{-1} c_1, c_1)_{L^2} = -\frac{M_0}{\Sigma_1} \int_{\Omega} (\mu_1 - m(\mu_1)) c_1 dx = -\frac{M_0}{\Sigma_1} \int_{\Omega} \mu_1 c_1 dx.$$

En utilisant ensuite les définitions de μ_1 et de $F_{\Lambda, \alpha}$, on a

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{d}{dt} ((-\Delta)^{-1} c_1, c_1)_{L^2} + \frac{3M_0\varepsilon}{4} |\nabla c_1|_{L^2}^2 \\ & + \frac{12M_0}{\varepsilon} \int_{\Omega} \left[c_1^2 (1 - \beta_1 c_2 c_3 + 2\Lambda \gamma_1 c_2^2 c_3^2 (\varphi_{\alpha}(c_2) + \varphi_{\alpha}(c_3))) + \Lambda \gamma_1 c_1 \Phi'_{\alpha}(c_1) c_2^2 c_3^2 \right] dx \\ & = \frac{12M_0}{\varepsilon} \int_{\Omega} c_1^3 (3 - 2c_1) dx \\ & + \frac{24M_0\Lambda}{\varepsilon} \frac{\Sigma_T}{3\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_3} \int_{\Omega} c_1^3 c_2 c_3 (\Sigma_2 c_2 + \Sigma_3 c_3) (\varphi_{\alpha}(c_1) + \varphi_{\alpha}(c_2) + \varphi_{\alpha}(c_3)) dx \\ & + \frac{12M_0\Lambda}{\varepsilon} \frac{\Sigma_T}{3\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_3} \int_{\Omega} c_1^3 c_2^2 c_3^2 (\Sigma_3 \varphi'_{\alpha}(c_2) + \Sigma_2 \varphi'_{\alpha}(c_3)) dx \end{aligned}$$

où

$$\beta_1 = \frac{6\Sigma_2\Sigma_3}{\Sigma_1\Sigma_2 + \Sigma_1\Sigma_3 + \Sigma_2\Sigma_3} = \frac{2\Sigma_T}{\Sigma_1} \quad \text{et} \quad \gamma_1 = \frac{\Sigma_T}{3\Sigma_1} \left(\frac{1}{\Sigma_2} + \frac{1}{\Sigma_3} \right) = \frac{(\Sigma_2 + \Sigma_3)}{\Sigma_1\Sigma_2 + \Sigma_1\Sigma_3 + \Sigma_2\Sigma_3}. \quad (\text{I.62})$$

Comme les conditions (I.14) et (I.15) sont vérifiées, on a $\gamma_1 > 0$. Ainsi le terme

$$\int_{\Omega} 2\Lambda \gamma_1 c_1^2 c_2^2 c_3^2 (\varphi_{\alpha}(c_2) + \varphi_{\alpha}(c_3)) dx$$

dans le membre de gauche de l'égalité précédente est positif. De plus, on peut écrire

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [c_1^2 (1 - \beta_1 c_2 c_3) + \Lambda \gamma_1 c_1 \Phi'_{\alpha}(c_1) c_2^2 c_3^2] dx &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} c_1 \Phi'_{\alpha}(c_1) (1 - \beta_1 c_2 c_3 + 2\Lambda \gamma_1 c_2^2 c_3^2) dx \\ &+ \int_{\Omega} c_1 \left(c_1 - \frac{1}{2} \Phi'_{\alpha}(c_1) \right) (1 - \beta_1 c_2 c_3) dx. \quad (\text{I.63}) \end{aligned}$$

On remarque que si $\Lambda > \frac{\beta_1^2}{8\gamma_1} > 0$, alors $1 - \beta_1 X + 2\Lambda \gamma_1 X^2 \geq 1 - \frac{\beta_1^2}{8\Lambda \gamma_1} > 0$, pour tout $X \in \mathbb{R}$. Ainsi, il vient

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} c_1 \Phi'_{\alpha}(c_1) (1 - \beta_1 c_2 c_3 + 2\Lambda \gamma_1 c_2^2 c_3^2) dx > \frac{1}{2} \int_{\Omega} c_1 \Phi'_{\alpha}(c_1) \left(1 - \frac{\beta_1^2}{8\Lambda \gamma_1} \right) dx \geq 0.$$

D'après (I.63), on a alors

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{d}{dt} ((-\Delta)^{-1} c_1, c_1)_{L^2} + \frac{3M_0\varepsilon}{4} |\nabla c_1|_{L^2}^2 + \frac{K_0}{\varepsilon} \int_{\Omega} c_1 \Phi'_{\alpha}(c_1) dx \\ & \leq \frac{12M_0}{\varepsilon} \int_{\Omega} c_1^3 (3 - 2c_1) dx - \frac{12M_0}{\varepsilon} \int_{\Omega} c_1 \left(c_1 - \frac{1}{2} \Phi'_{\alpha}(c_1) \right) (1 - \beta_1 c_2 c_3) dx \\ & + \frac{24M_0\Lambda}{\varepsilon} \frac{\Sigma_T}{3\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_3} \int_{\Omega} c_1^3 c_2 c_3 (\Sigma_2 c_2 + \Sigma_3 c_3) (\varphi_{\alpha}(c_1) + \varphi_{\alpha}(c_2) + \varphi_{\alpha}(c_3)) dx \\ & + \frac{12M_0\Lambda}{\varepsilon} \frac{\Sigma_T}{3\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_3} \int_{\Omega} c_1^3 c_2^2 c_3^2 (\Sigma_3 \varphi'_{\alpha}(c_2) + \Sigma_2 \varphi'_{\alpha}(c_3)) dx. \end{aligned}$$

Soient I_1, I_2, I_3, I_4 les quatre intégrales du membre de droite de l'inégalité précédente.

Pour le terme I_1 , on a l'estimation

$$|I_1| \leq K|c_1|_{L^3}^3 + K|c_1|_{L^4}^4.$$

Grâce au lemme I.3.13 et à l'inégalité de Hölder, on obtient

$$\begin{aligned} |I_2| &\leq K_\alpha \int_\Omega |c_1|^3 (1 + |c_2||c_3|) dx \leq K_\alpha |c_1|_{L^3}^3 + K_\alpha |c_1|_{L^{\frac{9}{2}}}^3 |c|_{L^6}^2, \\ |I_3| &\leq K_\alpha \int_\Omega \left[|c_1|^{3-2\alpha} |c|^3 + |c_1|^3 |c|^{3-2\alpha} \right] dx \\ &\leq K_\alpha |c_1|_{L^{6-4\alpha}}^{3-2\alpha} |c|_{L^6}^3 + K_\alpha |c_1|_{L^{\frac{18}{3+2\alpha}}}^3 |c|_{L^6}^{3-2\alpha}, \end{aligned}$$

et de la même manière,

$$|I_4| \leq K_\alpha \int_\Omega |c_1|^3 |c|^{3-2\alpha} dx \leq K_\alpha |c_1|_{L^{\frac{18}{3+2\alpha}}}^3 |c|_{L^6}^{3-2\alpha}.$$

D'après le théorème I.2.7, la norme de la solution \mathbf{c} dans $L^\infty(\mathbb{R}^+, H^1)$ est dominée par une constante qui dépend seulement de la constante \mathcal{K} . Comme on suppose que

$$0 < \alpha \leq \frac{8}{17},$$

en utilisant l'injection de Sobolev $H^1(\Omega) \subset L^6(\Omega)$ et l'inégalité de Poincaré, on a

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} ((-\Delta)^{-1} c_1, c_1)_{L^2} + \frac{\varepsilon}{K_p} |c_1|_{H^1}^2 &\leq K_\alpha |c_1|_{L^{\frac{9}{2}}}^3 + K|c_1|_{L^3}^3 + K|c_1|_{L^4}^4 \\ &\quad + K_\alpha |c_1|_{L^{\frac{18}{3+2\alpha}}}^3 + K_\alpha |c_1|_{L^{6-4\alpha}}^{3-2\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{I.64})$$

Des injections $H^{\frac{5}{6}} \subset L^{\frac{9}{2}} \subset L^4 \subset L^3$ et de l'interpolation $H^{\frac{5}{6}} = [H^1, L^2]_{\frac{1}{6}}$, il vient

$$K_\alpha |c_1|_{L^{\frac{9}{2}}}^3 + K|c_1|_{L^3}^3 + K|c_1|_{L^4}^4 \leq K_\alpha |c_1|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |c_1|_{H^1}^{\frac{5}{2}} + K_\alpha |c_1|_{L^2}^{\frac{2}{3}} |c_1|_{H^1}^{\frac{10}{3}}.$$

De même, grâce à $H^{\frac{3-3\alpha}{3-2\alpha}} \subset L^{6-4\alpha}$, $H^{\frac{3-3\alpha}{3-2\alpha}} = [H^1, L^2]_{\frac{\alpha}{3-2\alpha}}$ et à l'inégalité de Poincaré, on obtient

$$|c_1|_{L^{6-4\alpha}}^{3-2\alpha} \leq K_\alpha |c_1|_{L^2}^\alpha |c_1|_{H^1}^{3-3\alpha} \leq K_\alpha |c_1|_{L^2}^{\frac{\alpha}{4}} |c_1|_{H^1}^{3-\frac{9}{4}\alpha}.$$

Finalement, l'injection $H^{\frac{3-\alpha}{3}} \subset L^{\frac{18}{3+2\alpha}}$ et l'interpolation $H^{\frac{3-\alpha}{3}} = [H^1, L^2]_{\frac{\alpha}{3}}$ entraînent que

$$|c_1|_{L^{\frac{18}{3+2\alpha}}}^3 \leq K_\alpha |c_1|_{L^2}^\alpha |c_1|_{H^1}^{3-\alpha}.$$

En introduisant $y(t) = ((-\Delta)^{-1} c_1, c_1)_{L^2}$, $z(t) = |c_1|_{H^1}^2$ et en utilisant la propriété d'interpolation (I.58), nous déduisons de (I.64) et des estimations précédentes

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} y(t) + \frac{\varepsilon}{K_p} z(t) \leq K_\alpha \left(z^{\frac{11}{8}} y^{\frac{1}{8}} + z^{\frac{11}{6}} y^{\frac{1}{6}} + z^{\frac{24-17\alpha}{16}} y^{\frac{\alpha}{16}} + z^{\frac{6-\alpha}{4}} y^{\frac{\alpha}{4}} \right), \quad \forall t \geq 0. \quad (\text{I.65})$$

D'après le théorème I.2.7, z est uniformément borné en temps par une constante $C_{\mathcal{K}}$ qui dépend seulement de \mathcal{K} et $y \in C^0(\mathbb{R})$. Choisissons δ assez petit pour avoir

$$K_\alpha \left(C_{\mathcal{K}}^{\frac{3}{8}} \delta^{\frac{1}{4}} + C_{\mathcal{K}}^{\frac{5}{6}} \delta^{\frac{1}{3}} + C_{\mathcal{K}}^{\frac{8-17\alpha}{16}} \delta^{\frac{\alpha}{8}} + C_{\mathcal{K}}^{\frac{2-\alpha}{4}} \delta^{\frac{\alpha}{2}} \right) \leq \frac{\varepsilon}{4K_p}. \quad (\text{I.66})$$

On remarque que $8 - 17\alpha \geq 0$ grâce à la condition (I.45) vérifiée par α . Comme on suppose $y(0) \leq \delta^2$, la continuité de y et z en temps implique qu'il existe un temps maximal $T_0 \in]0; +\infty]$ tel que

$$K_\alpha \left(z^{\frac{3}{8}} y^{\frac{1}{8}} + z^{\frac{5}{6}} y^{\frac{1}{6}} + z^{\frac{8-17\alpha}{16}} y^{\frac{\alpha}{16}} + z^{\frac{2-\alpha}{4}} y^{\frac{\alpha}{4}} \right) \leq \frac{\varepsilon}{2K_p}, \quad \forall 0 \leq t < T_0. \quad (\text{I.67})$$

Les inégalités (I.65) et (I.67) entraînent

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} y(t) + \frac{\varepsilon}{K_p} z(t) \leq \frac{\varepsilon}{2K_p} z(t), \quad \forall 0 \leq t \leq T_0,$$

et donc

$$\frac{d}{dt} y(t) + \frac{\varepsilon}{K_p} z(t) \leq 0, \quad \forall 0 \leq t \leq T_0.$$

En notant que $\lambda_0^2 y(t) \leq z(t)$, où λ_0 est la première valeur propre non nulle de l'opérateur $(-\Delta)$ avec des conditions de Neumann au bord, on a

$$\frac{d}{dt} y(t) + \gamma y(t) \leq 0, \quad \forall 0 \leq t \leq T_0,$$

et $\gamma = \frac{\varepsilon \lambda_0^2}{K_p}$. Ainsi, on obtient

$$y(t) \leq y(0) e^{-\gamma t}, \quad \forall 0 \leq t < T_0.$$

En particulier $y(t) \leq \delta^2$ et donc en utilisant (I.66), on a pour tout $t \leq T_0$

$$K_\alpha \left(z^{\frac{3}{8}} y^{\frac{1}{8}} + z^{\frac{5}{6}} y^{\frac{1}{6}} + z^{\frac{8-17\alpha}{16}} y^{\frac{\alpha}{16}} + z^{\frac{2-\alpha}{4}} y^{\frac{\alpha}{4}} \right) \leq \frac{\varepsilon}{4K_p}, \quad \forall 0 \leq t < T_0.$$

Finalement, grâce à la continuité de y en temps et à la maximalité de T_0 vérifiant la propriété (I.67), nous pouvons conclure que $T_0 = +\infty$, ce qui termine la démonstration. \blacksquare

La même démarche est utilisée pour la preuve du théorème I.3.19.

Preuve.

Nous considérons ici le cas où $\Lambda = 0$, c'est-à-dire $F = F_0$. En utilisant la même approche que précédemment, nous obtenons le cas particulier

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} ((-\Delta)^{-1} c_1, c_1)_{L^2} + \frac{3M_0\varepsilon}{4} |\nabla c_1|_{L^2}^2 + \frac{12M_0}{\varepsilon} \int_{\Omega} c_1^2 \left(1 - \beta_1 \left(c_2 + \frac{c_1}{2} \right) \left(1 - \left(c_2 + \frac{c_1}{2} \right) \right) \right) dx \\ = \frac{12M_0}{\varepsilon} \int_{\Omega} \left[c_1^3 \left(3 - \frac{\beta_1}{2} \right) + c_1^4 \left(\frac{\beta_1}{4} - 2 \right) \right] dx, \end{aligned} \quad (\text{I.68})$$

où $c_2 = c_2 + \frac{c_1}{2} - \frac{c_1}{2}$, et $c_3 = 1 - c_1 - c_2 = 1 - \left(c_2 + \frac{c_1}{2} \right) - \frac{c_1}{2}$.

Comme $\Sigma_i > \frac{\Sigma_T}{2} > 0$, (I.62) entraîne que $\beta_1 < 4$. Par conséquent, on a

$$1 - \beta_1 X(1 - X) > 1 - \frac{\beta_1}{4} > 0,$$

pour tout $X \in \mathbb{R}$. L'intégrale dans le membre de gauche de (I.68) est donc positive. En utilisant l'inégalité de Young, il vient

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} ((-\Delta)^{-1} c_1, c_1)_{L^2} + \frac{3M_0\varepsilon}{4} |\nabla c_1|_{L^2}^2 \leq K \left(|c_1|_{L^3}^3 + |c_1|_{L^4}^4 \right).$$

Puis nous utilisons l'injection de Sobolev $H^{\frac{3}{4}} \subset L^4$ en dimension 2 et 3, ainsi que l'interpolation $H^{\frac{3}{4}} = [H^1, L^2]_{\frac{1}{4}}$ et la propriété d'interpolation (I.58) pour conclure par le même argument que dans la preuve précédente. \blacksquare

I.4 Modèle couplé de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes

Nous avons construit un modèle de Cahn-Hilliard triphasique vérifiant les propriétés de consistance algébrique et dynamique souhaitées. Pour prendre en compte l'hydrodynamique du mélange, les équations de Cahn-Hilliard sont couplées aux équations de Navier-Stokes dans le cas d'un écoulement anisotherme, incompressible [70] en s'inspirant des travaux réalisés pour des mélanges diphasiques [15, 59, 67].

Dans chaque phase i , la vitesse u_i et la pression p_i vérifient

$$\begin{cases} \varrho_i \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \cdot \nabla u_i \right) - \nabla \cdot (\eta_i (\nabla u_i + \nabla u_i^t)) + \nabla p_i = \varrho_i g, \\ \nabla \cdot u_i = 0, \end{cases}$$

où ϱ_i est la masse volumique, η_i , la viscosité dynamique et g , l'accélération de la pesanteur. L'interface entre la phase i et j est notée I_{ij} et n_{ij} est le vecteur unitaire normal à l'interface orienté de la phase i vers la phase j . En supposant qu'il n'y a pas de transferts de masse à l'interface et que la tension de surface σ_{ij} est constante, les conditions de saut sur I_{ij} sont ([32], annexe C)

$$u_i \cdot n_{ij} = u_j \cdot n_{ij}, \quad (\text{I.69})$$

$$(\tau_j - \tau_i)n_{ij} + \sigma_{ij}\kappa n_{ij} = 0, \quad (\text{I.70})$$

où τ_i est le tenseur de contrainte et κ est la courbure moyenne de l'interface. Dans l'équation (I.70), le saut de la contrainte normale est compensé par la force de tension de surface $\sigma_{ij}\kappa n_{ij}$. De plus, d'après une observation empirique [32], la vitesse tangentielle est continue sur I_{ij}

$$u_i \cdot t = u_j \cdot t,$$

ce qui entraîne la continuité des vitesse sur I_{ij}

$$u_i = u_j.$$

On peut donc définir une vitesse moyenne u , unique, régulière sur tout le domaine.

Pour coupler les équations de Cahn-Hilliard et de Navier-Stokes, un terme d'advection est ajouté aux équations d'évolution des paramètres d'ordre

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + (u \cdot \nabla)c_i = \nabla \cdot \left(\frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right),$$

où la définition des potentiels chimiques μ_i reste la même que dans (I.10). De plus, les équations de Navier-Stokes sont vérifiées sur tout le domaine Ω

$$\begin{cases} \varrho(\mathbf{c}) \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) - \nabla \cdot (\eta(\mathbf{c})(\nabla u + \nabla u^t)) + \nabla p = \sum_{i=1}^3 \mu_i \nabla c_i + \varrho(\mathbf{c})g, \\ \nabla \cdot u = 0. \end{cases}$$

Dans ce cadre, les propriétés thermophysiques telles que la masse volumique et la viscosité sont approchées par des fonctions régulières qui dépendent des paramètres d'ordre et vérifient

$$\varrho(c_1, c_2, c_3) = \varrho_i \text{ si } c_i = 1 \quad \text{et} \quad \eta(c_1, c_2, c_3) = \eta_i \text{ si } c_i = 1. \quad (\text{I.71})$$

Pour traiter le saut (I.70), la force de tension de surface est approchée par une force volumique [18], appelée force capillaire

$$f_{ca} = \sum_{i=1}^3 \mu_i \nabla c_i, \quad (\text{I.72})$$

qui est ajoutée à l'équation de bilan de quantité de mouvement [3, 15, 24]. Cette force est non nulle seulement dans la zone interfaciale. Enfin, les conditions au bord restent inchangées pour les paramètres d'ordre et les potentiels chimiques

$$\nabla c_i \cdot n = \nabla \mu_i \cdot n = 0 \text{ sur } \Gamma.$$

De plus, la vitesse et la pression vérifient sur Γ

$$u \cdot n = 0 \text{ et } (-p + \eta(\mathbf{c})(\nabla u + \nabla u^t)) \cdot n = 0.$$

Ce faisant, la création d'énergie libre par convection est égale et opposée à la création d'énergie cinétique par capillarité [59]. En effet, pour écrire la loi d'évolution de l'énergie totale du système (énergie cinétique et énergie de Cahn-Hilliard), on multiplie l'équation d'évolution de c_i par μ_i et celle de la vitesse par u . En sommant les équations, la contribution des termes de transports compense exactement la contribution des forces capillaires.

Dans la littérature (*e.g.* [14, 67]), on trouve différentes formes de force capillaire qui sont équivalentes en modifiant la définition de la pression [59]. Ainsi par analogie au problème diphasique, on remarque

$$\sum_{i=1}^3 \mu_i \nabla c_i = - \sum_{i=1}^3 c_i \nabla \mu_i + \nabla \left(\sum_{i=1}^3 c_i \mu_i \right).$$

En ajoutant $\sum_{i=1}^3 c_i \mu_i$ dans la définition de la pression, on peut prendre $f_{ca}^{(2)} = - \sum_{i=1}^3 c_i \nabla \mu_i$ comme force capillaire. Dans [59, 70], la force capillaire est définie par

$$f_{ca}^{(3)} = \sum_{i=1}^3 \nabla \cdot \left(\frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \left(\frac{1}{2} |\nabla c_i|^2 I - \nabla c_i \otimes \nabla c_i \right) \right).$$

En utilisant les relations

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\nabla c \otimes \nabla c) &= (\nabla c \cdot \nabla) \nabla c + \Delta c \nabla c, \\ \nabla \left(\frac{1}{2} |\nabla c|^2 \right) &= (\nabla c \cdot \nabla) \nabla c, \end{aligned}$$

il vient

$$f_{ca}^{(3)} = \sum_{i=1}^3 -\frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i \nabla c_i.$$

Grâce à la définition des potentiels chimiques dans (I.10)

$$\mu_i = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c})) \right) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i$$

et à la propriété $\sum_{i=1}^3 \nabla c_i = 0$, on obtient

$$f_{ca}^{(3)} = \sum_{i=1}^3 \mu_i \nabla c_i + \frac{12}{\varepsilon} \nabla F(\mathbf{c}).$$

Finalement, on retrouve l'expression (I.72) de la force capillaire en ajoutant $\frac{12}{\varepsilon}F(\mathbf{c})$ dans la définition de la pression.

Remarque I.4.20

L'équation du bilan de masse écrite sous la forme (car $\nabla \cdot u = 0$)

$$\frac{\partial \varrho(\mathbf{c})}{\partial t} + u \cdot \nabla \varrho(\mathbf{c}) = 0$$

n'est pas satisfaite sur tout le domaine Ω puisque la masse volumique dépend des paramètres d'ordre qui ont leur propre équation d'évolution. Par contre, elle est vérifiée localement dans les zones où $\varrho(\mathbf{c})$ est uniforme c'est-à-dire dans chacune des phases d'après (I.71).

Pour un écoulement anisotherme, il faut ajouter l'équation du bilan d'énergie. Le champ de température satisfait une équation d'advection-diffusion

$$\varrho(\mathbf{c})c_p(\mathbf{c}) \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda(\mathbf{c}) \nabla T),$$

où c_p la chaleur massique et λ la conductivité dépendent des paramètres d'ordre et sont approchées comme la masse volumique et la viscosité.

Remarque I.4.21

Le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes anisotherme permet un suivi implicite des interfaces sans mise en œuvre de méthodes numériques spécifiques aux problèmes à frontière mobile.

Chapitre II

Théorèmes d'existence et de stabilité

Dans ce chapitre, nous présentons une étude du modèle de Cahn-Hilliard triphasique (I.10) exposé dans le chapitre précédent. Nous nous plaçons dans un cadre plus général que celui de systèmes composés de phases non miscibles. Nous nous intéressons en particulier à l'existence et l'unicité des solutions et à la stabilité asymptotique de certains mélanges uniformes.

La première étude menée sur le problème de Cahn-Hilliard à n phases a été faite par Elliott et Luckhaus [38]. Ils montrent l'existence et l'unicité d'une solution globale en supposant la mobilité constante et en prenant un potentiel de Cahn-Hilliard sous forme logarithmique. L'hypothèse de la mobilité dégénérée a été traitée dans [37] où seulement l'existence globale est prouvée, le problème de l'unicité restant ouvert comme en diphasique. Blowey et *al.* [7, 8] ont montré plus de régularité sur la solution que dans [38] en prenant le potentiel de Cahn-Hilliard sous forme logarithmique et en supposant que la mobilité dépend des paramètres d'ordre. Toutes ces études sont faites sur le problème de Cahn-Hilliard sans écoulement ($u \equiv 0$). Récemment, le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes a été étudié dans le cas diphasique [14, 15].

Pour notre étude, la mobilité dépend des paramètres d'ordre mais elle n'est pas dégénérée. La vitesse est supposée nulle et seules les équations de Cahn-Hilliard sont étudiées. Le potentiel de Cahn-Hilliard F vérifie des hypothèses plus générales que dans [14, 99] (remarque I.2.6). Nous montrons l'existence globale et l'unicité de solutions faibles du problème (I.10) en dimension 2 (théorème I.2.7). On a un résultat similaire en dimension 3 si on suppose, en plus, que la mobilité est constante. On montre aussi l'existence et l'unicité de solutions fortes, en supposant plus de régularité sur la donnée initiale et sur le potentiel de Cahn-Hilliard (théorème II.2.1) ce qui permet de montrer l'unicité des solutions en dimension 3 quand la mobilité est variable, non dégénérée. En particulier, une telle solution est continue en espace et en temps. En dimension 2, on montre l'existence et l'unicité globale des solutions fortes tandis qu'en dimension 3, on a seulement l'existence et l'unicité locale sur $[0; t_f[$ avec $t_f < +\infty$. Enfin, la régularité des solutions fortes est utilisée pour établir un résultat de stabilité asymptotique des états métastables (théorème II.3.2) c'est-à-dire des mélanges qui sont des points de convexité de F . Dans ce cas, on a l'existence globale des solutions en dimension 2 et 3. Les preuves des résultats énoncés reposent sur l'utilisation d'une approximation de Galerkin [14] et des résultats de compacité. Les théorèmes d'analyse fonctionnelle utilisés sont rappelés dans l'annexe B.

Dans le premier paragraphe, nous traitons l'existence et l'unicité des solutions faibles. La preuve du théorème I.2.7 est donnée en dimension 2 et 3. La deuxième partie est dédiée à l'étude des solutions fortes. Enfin, le dernier paragraphe porte sur la stabilité asymptotique de solutions particulières correspondant aux états d'équilibre métastable.

Dans ce chapitre, nous ne cherchons pas à faire tendre ε vers 0, ainsi toutes les estimations dépendent de ε .

II.1 Théorème d'existence et d'unicité des solutions faibles

Dans ce paragraphe, nous allons donner la preuve du théorème I.2.7 énoncé dans le chapitre précédent sur l'existence et l'unicité des solutions faibles. Nous rappelons les hypothèses utilisées sur les fonctions M_0 et F .

Si $d = 2$, la mobilité M_0 est de classe \mathcal{C}^1 et il existe $M_1, M_2, M_3 > 0$ tel que

$$\text{hypothèse (I.22)} : M_1 \leq M_0(\mathbf{c}) \leq M_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S},$$

$$\text{hypothèse (I.23)} : |DM_0(\mathbf{c})| \leq M_3, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}.$$

Si $d = 3$, la mobilité est constante et il existe $M > 0$ tel que

$$\text{hypothèse (I.24)} : M_0 = M.$$

En dimension 3, les hypothèses (I.22) et (I.23) suffisent pour prouver l'existence des solutions faibles mais nous supposons (I.24) pour montrer l'unicité.

De plus, on suppose que :

- minoration de F : F est de classe \mathcal{C}^2 et vérifie

$$\text{hypothèse (I.17)} : F(\mathbf{c}) \geq 0, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S},$$

- croissance polynômiale : il existe $B_1, B_2 > 0$ tels que

$$\text{hypothèse (I.18)} : |F(\mathbf{c})| \leq B_1 |\mathbf{c}|^p + B_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S},$$

$$\text{hypothèse (I.19)} : |DF(\mathbf{c})| \leq B_1 |\mathbf{c}|^{p-1} + B_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S},$$

$$\text{hypothèse (I.20)} : |D^2F(\mathbf{c})| \leq B_1 |\mathbf{c}|^{p-2} + B_2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S},$$

où $p = 6$ si $d = 3$, et $2 \leq p < +\infty$ si $d = 2$,

- minoration de la matrice hessienne de F : il existe $D_1 \geq 0$ tel que

$$\text{hypothèse (I.21)} : (D^2F(\mathbf{c})\xi, \xi) \geq -D_1 (1 + |\mathbf{c}|^q) |\xi|^2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}, \forall \xi \in \mathbb{R}^3,$$

où $0 \leq q < 4$ si $d = 3$ et $0 \leq q < +\infty$ si $d = 2$.

Théorème (Existence et unicité des solutions faibles)

Soit Ω un domaine régulier borné dans \mathbb{R}^d , avec $d = 2$ ou 3 . On suppose que les conditions (I.14), (I.15) et les hypothèses (I.17)-(I.21) sur F et (I.22)-(I.24) sur M_0 sont vérifiées. Quel que soit $\mathbf{c}^0 \in \mathbb{H}_S^1(\Omega)$, il existe une unique solution faible $(\mathbf{c}, \boldsymbol{\mu})$ de (I.10) sur $[0, +\infty[$ vérifiant les conditions au bord (I.12) et dont \mathbf{c}^0 est la donnée initiale telle que

$$\mathbf{c} \in L^\infty(0, +\infty; \mathbb{H}_S^1(\Omega)) \cap L_{loc}^2(0, +\infty; (H^3(\Omega))^3) \cap \mathcal{C}^0([0, +\infty[; \mathbb{H}_S^1(\Omega)), \quad (\text{II.1})$$

$$\boldsymbol{\mu} \in L^2(0, +\infty; (H^1(\Omega))^3). \quad (\text{II.2})$$

Pour démontrer le théorème, nous allons utiliser une approximation de Galerkin et établir des estimations d'énergie. Celles-ci permettront de passer à la limite dans les équations et de prouver l'existence d'une solution au problème (I.10). Nous établissons ensuite des estimations supplémentaires (de type régularité) afin de montrer l'unicité des solutions.

Preuve.

Etape 1 : Approximation de Galerkin

On introduit la famille $(\varphi^j)_{j \geq 1}$ de fonctions propres de l'opérateur $-\Delta$ (avec conditions de Neumann sur le bord). On choisit $\varphi^1 = 1$ et les $(\varphi^j)_{j \geq 1}$ sont orthogonaux à la fois dans L^2 et H^1 . On définit $\Phi^n = \text{vect}(\varphi^1, \dots, \varphi^n)$ l'espace engendré par la famille $(\varphi^j)_{1 \leq j \leq n}$. On note P_{Φ^n} le projecteur orthogonal sur Φ^n dans L^2 .

On cherche un couple $(\mathbf{c}^n, \boldsymbol{\mu}^n)$ défini pour $i = 1, 2, 3$ par

$$c_i^n = \sum_{\ell=1}^n \alpha_i^\ell(t) \varphi^\ell, \quad \mu_i^n = \sum_{\ell=1}^n \beta_i^\ell(t) \varphi^\ell$$

où α_i^ℓ et β_i^ℓ sont des fonctions de classe \mathcal{C}^1 , telles que $\mathbf{c}^n(0) = P_{\Phi^n}(\mathbf{c}^0)$ et

$$\forall \varphi \in \Phi^n, \quad \frac{d}{dt}(c_i^n, \varphi) = - \int_{\Omega} \frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i^n \cdot \nabla \varphi \, dx, \quad (\text{II.3})$$

$$\forall \varphi \in \Phi^n, \quad \int_{\Omega} \mu_i^n \varphi \, dx = \int_{\Omega} \left[\frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \nabla c_i^n \cdot \nabla \varphi + \frac{4 \Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}^n) - \partial_j F(\mathbf{c}^n)) \right) \varphi \right] dx. \quad (\text{II.4})$$

Le problème (II.3) est un système d'équations aux dérivées ordinaires où les inconnues sont les fonctions α_i^ℓ puisque β_i^j s'exprime comme une fonction non linéaire de $(\alpha_i^\ell)_{i,\ell}$ dans (II.4). Comme les fonctions M_0 et DF sont localement lipschitziennes, d'après le théorème de Cauchy-Lipschitz, il existe une unique solution au problème (II.3)-(II.4) dans un intervalle maximal de temps $[0, t^n]$, avec $t^n \in]0, +\infty]$.

Comme $\mathbf{c}^0 \in \mathcal{S}$, on a $c_1^0 + c_2^0 + c_3^0 = 1$, et

$$c_1^n(0) + c_2^n(0) + c_3^n(0) = P_{\Phi^n} 1 = 1$$

car φ^1 est égale à 1 et appartient à tous les espaces d'approximation de Galerkin Φ^n . De plus, le système (II.3)-(II.4) est construit pour assurer que pour tout $t \in [0, t^n]$

$$\sum_{i=1}^3 c_i^n(t) = 1. \quad (\text{II.5})$$

Par conséquent, $\mathbf{c}^n(t) \in \mathcal{S}$ pour tout n et tout $t \in [0, t^n]$.

Etape 2 : Conservation de la masse

En utilisant (II.3) avec $\varphi = \varphi^1 = 1$, nous trouvons

$$\frac{d}{dt} m(c_i^n) = \frac{1}{|\Omega|} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} c_i^n(t) \, dx = \frac{1}{|\Omega|} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} c_i^n(t) \varphi^1 \, dx = - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \cdot \nabla \varphi^1 \, dx = 0.$$

Ainsi pour tout $t \in [0, t^n]$, il vient

$$m(c_i^n(t)) = m(c_i^n(0)) = m(P_{\Phi^n}(c_i^0)) = m(c_i^0). \quad (\text{II.6})$$

Etape 3 : Estimation d'énergie

Prenons $\varphi = \mu_i^n$ dans l'équation (II.3) et $\varphi = \frac{dc_i^n}{dt}$ dans l'équation (II.4). On obtient pour tout $i \in \{1, 2, 3\}$,

$$\left(\frac{dc_i^n}{dt}, \mu_i^n \right) = - \int_{\Omega} \frac{M_0}{\Sigma_i} |\nabla \mu_i^n|^2 dx,$$

et

$$\left(\frac{dc_i^n}{dt}, \mu_i^n \right) = \int_{\Omega} \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \nabla c_i^n \cdot \nabla \frac{dc_i^n}{dt} dx + \int_{\Omega} \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}^n) - \partial_j F(\mathbf{c}^n)) \right) \frac{dc_i^n}{dt} dx.$$

Lorsqu'on somme les équations sur i de 1 à 3 et en utilisant la propriété $\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^3 c_i^n = 0$, il vient

$$\frac{d}{dt} \left[\int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_i |\nabla c_i^n|^2 dx + \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} F(\mathbf{c}^n) dx \right] + \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{M_0}{\Sigma_i} |\nabla \mu_i^n|^2 dx = 0. \quad (\text{II.7})$$

On remarque que le terme sous la dérivée en temps est l'énergie totale du système $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}^n(t))$. La proposition I.2.3 et la propriété (I.11) impliquent

$$\sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{M_0}{\Sigma_i} |\nabla \mu_i^n|^2 dx = \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} M_0 \Sigma_i \left| \frac{\nabla \mu_i^n}{\Sigma_i} \right|^2 dx \geq \Sigma M_0 \sum_{i=1}^3 \frac{1}{\Sigma_i^2} |\nabla \mu_i|^2_{L^2}. \quad (\text{II.8})$$

En particulier ce terme est positif et nous obtenons donc que l'énergie totale du système décroît en temps. De plus, nous pouvons contrôler l'énergie à $t = 0$ comme suit

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_i |\nabla c_i^n(0)|^2 dx + \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} F(\mathbf{c}^n(0)) dx &\leq \sum_{i=1}^3 \frac{3}{8} \varepsilon |\Sigma_i| |\nabla c_i^0|_{L^2}^2 + \frac{12}{\varepsilon} (B_1 |\mathbf{c}^n(0)|_{L^p}^p + B_2 |\Omega|) \\ &\leq K_1 + K_2 \sum_{i=1}^3 |P_{\Phi^n} c_i^0|_{H^1}^p \leq K_1 + K_2 |\mathbf{c}^0|_{H^1}^p, \end{aligned}$$

car $1 \leq p < +\infty$ pour $d = 2$ dans (I.18) et $p = 6$ pour $d = 3$. On pose

$$k_1 = K_1 + K_2 |\mathbf{c}^0|_{H^1}^p. \quad (\text{II.9})$$

Nous avons donc obtenu une borne pour l'énergie totale $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}^n(t))$ qui ne dépend ni de t ni de n . Par conséquent, en utilisant la proposition I.2.3 (et (II.5)) et l'hypothèse (I.17), nous trouvons que la semi-norme $H^1(\Omega)$ de $\mathbf{c}^n(t)$ est contrôlée par l'énergie totale. Ainsi grâce à (II.6), nous obtenons que le temps d'existence du problème approché est $t^n = +\infty$ et aussi

$$|\mathbf{c}^n|_{L^\infty(0, \infty; H^1)} \leq C k_1. \quad (\text{II.10})$$

On déduit de l'estimation (II.7), en utilisant (II.8), que

$$|\nabla \mu^n|_{L^2(0, \infty; L^2)} \leq C k_1. \quad (\text{II.11})$$

Pour pouvoir ensuite appliquer l'inégalité de Poincaré, on a besoin d'une estimation sur $m(\mu_i)$. En fait, il existe une constante K indépendante de t et de n telle que

$$|m(\mu_i^n)| \leq K, \quad \forall i \in \{1, 2, 3\}. \quad (\text{II.12})$$

En effet, nous avons

$$\begin{aligned} m(\mu_i^n) &= (\mu_i^n, \varphi^1) = \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i (-\Delta c_i^n, \varphi^1) + \left(\frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}^n) - \partial_j F(\mathbf{c}^n)) \right), \varphi^1 \right) \\ &= \int_{\Omega} \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}^n) - \partial_j F(\mathbf{c}^n)) \right) dx, \end{aligned}$$

grâce à la condition de Neumann $\nabla c_i^n \cdot \mathbf{n} = 0$ sur Γ . En utilisant (I.19), il vient

$$\begin{aligned} |m(\mu_i^n)| &\leq \frac{4|\Sigma_T|}{\varepsilon} \int_{\Omega} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{|\Sigma_j|} (|\partial_i F(\mathbf{c}^n)| + |\partial_j F(\mathbf{c}^n)|) \right) dx \\ &\leq K \left(\int_{\Omega} B_1 |\mathbf{c}^n|^{p-1} dx + B_2 |\Omega| \right) \leq K \left(1 + |\mathbf{c}^n|_{H^1}^{p-1} \right), \end{aligned}$$

car $1 \leq p < +\infty$ si $d = 2$ et $p = 6$ si $d = 3$. D'après les estimations (II.7) et (II.10), on en déduit (II.12). Finalement, en combinant (II.11) et (II.12) et en utilisant l'inégalité de Poincaré, nous obtenons

$$|\mu^n|_{L^2(0, t_f; H^1)} \leq K(1 + t_f), \quad \forall t_f > 0. \quad (\text{II.13})$$

Pour pouvoir appliquer le théorème de compacité d'Aubin-Lions-Simon, nous avons besoin d'une estimation pour $\frac{\partial \mathbf{c}^n}{\partial t}$ dans l'espace $L^2(0, t_f; (H^{-1}(\Omega))^3)$. De l'équation (II.3), on déduit que

$$\begin{aligned} \left| \int_0^{t_f} \left\langle \frac{\partial c_i^n}{\partial t}, \varphi \right\rangle_{H^{-1}, H_0^1} dt \right| &= \left| \int_0^{t_f} \int_{\Omega} \frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i^n \cdot \nabla P_{\Phi^n} \varphi dx dt \right| = \left| \int_0^{t_f} \int_{\Omega} \frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i^n \cdot \nabla \varphi dx dt \right| \\ &\leq K |\nabla \mu_i^n|_{L^2(0, t_f; L^2)} |\nabla \varphi|_{L^2(0, t_f; L^2)} \leq K |\nabla \varphi|_{L^2(0, t_f; L^2)}, \quad \forall i \in \{1, 2, 3\}, \end{aligned}$$

pour tout $\varphi \in L^2(0, t_f; H_0^1(\Omega))$, grâce à l'estimation (II.11). Ainsi on a

$$\left| \frac{\partial \mathbf{c}^n}{\partial t} \right|_{L^2(0, t_f; H^{-1})} \leq K. \quad (\text{II.14})$$

Etape 4 : Passage à la limite dans les équations (II.3) et (II.4)

Grâce aux estimations (II.10), (II.13) et (II.14), on peut extraire des sous-suites de $(\mathbf{c}^n)_n$ et $(\mu^n)_n$ (notées encore $(\mathbf{c}^n)_n$ et $(\mu^n)_n$) qui satisfont

$$\begin{array}{lll} \mathbf{c}^n & \rightharpoonup & \mathbf{c} \quad \text{dans } L^\infty(0, \infty, (H^1(\Omega))^3) \text{ faible-}, \\ \frac{\partial \mathbf{c}^n}{\partial t} & \rightharpoonup & \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} \quad \text{dans } L_{loc}^2(0, \infty, (H^{-1}(\Omega))^3) \text{ faible}, \\ \mu^n & \rightharpoonup & \mu \quad \text{dans } L_{loc}^2(0, \infty, (H^1(\Omega))^3) \text{ faible}. \end{array}$$

D'après le théorème de compacité d'Aubin-Lions-Simon et les estimations (II.10) et (II.14), on peut extraire une sous-suite

$$\mathbf{c}^n \rightarrow \mathbf{c} \text{ dans } \mathcal{C}^0([0, t_f], (L^p(\Omega))^3) \text{ fort, } \quad \forall t_f > 0,$$

où $p < +\infty$ si $d = 2$ et $p < 6$ si $d = 3$. De plus, $\mathbf{c}^n(0)$ converge fortement vers $\mathbf{c}(0)$ dans $(L^2(\Omega))^3$ et ainsi $\mathbf{c}(0) = \mathbf{c}^0$ car P_{Φ^n} converge vers l'identité pour la topologie forte des opérateurs. En particulier, on a la convergence forte dans $L^2(0, t_f; L^p(\Omega))$ et d'après la réciproque du théorème de Lebesgue \mathbf{c}^n converge presque partout vers \mathbf{c} (modulo une sous-suite).

Montrons que les limites \mathbf{c} et $\boldsymbol{\mu}$ vérifient le problème (I.10). Pour cela, on considère $\tau \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^{+*})$ et $N \geq 1$. Pour tout $n \geq N$, \mathbf{c}^n , et $\boldsymbol{\mu}^n$ vérifient (II.3) et (II.4) avec $\varphi = \varphi^N$. On multiplie ces équations par $\tau(t)$ et on intègre par rapport au temps. Les convergences faibles établies permettent de passer à la limite dans chacun des termes linéaires. Pour le terme non linéaire de l'équation (II.4), on utilise alors l'hypothèse (I.18), la convergence presque partout et le théorème de convergence dominée. Les équations limites étant satisfaites pour tout N et pour tout $\tau \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^{+*})$, la densité de $(\Phi^n)_n$ dans $H^1(\Omega)$ nous permet de conclure que $(\mathbf{c}, \boldsymbol{\mu})$ vérifient le problème (I.10).

Etape 5 : Estimations dans $L^4(0, t_f; H^2(\Omega))$ et dans $L^2(0, t_f; H^3(\Omega))$

Soit $(\mathbf{c}, \boldsymbol{\mu})$ la solution faible de (I.10) obtenue précédemment. Nous avons déjà montré que \mathbf{c} appartient à $L^\infty(0, +\infty, (H^1(\Omega))^3)$ et que $\nabla \boldsymbol{\mu}$ appartient à $L^2(0, +\infty, (L^2(\Omega))^9)$. Maintenant, nous avons besoin de plus de régularité sur la solution \mathbf{c} pour démontrer l'unicité dans l'étape suivante.

1/ Tout d'abord, nous cherchons une estimation pour $\Delta \mathbf{c}$ dans $(L^2(\Omega))^3$. Pour cela, on choisit $\varphi = -\Delta c_i^n$ dans l'équation (II.4) pour $i \in \{1, 2, 3\}$,

$$(\nabla \mu_i, \nabla c_i) = \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i |\Delta c_i|_{L^2}^2 - \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \int_{\Omega} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c})) \right) \Delta c_i dx.$$

En sommant les équations sur i et en remarquant que $\sum_{i=1}^3 \Delta c_i = 0$ grâce à (II.5), on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 (\nabla \mu_i, \nabla c_i) &= \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i |\Delta c_i|_{L^2}^2 - \frac{12}{\varepsilon} \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \partial_i F(\mathbf{c}) \Delta c_i dx \\ &= \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i |\Delta c_i|_{L^2}^2 + \frac{12}{\varepsilon} \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \nabla \partial_i F(\mathbf{c}) \cdot \nabla c_i dx. \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$

Grâce à l'hypothèse (I.21) et à la propriété de conservation de la masse, on peut écrire

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \nabla \partial_i F(\mathbf{c}) \cdot \nabla c_i dx &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^d \int_{\Omega} \partial_i \partial_j F(\mathbf{c}) \frac{\partial c_j}{\partial x_k} \frac{\partial c_i}{\partial x_k} dx \\ &= \sum_{k=1}^d \int_{\Omega} \left(D^2 F(\mathbf{c}) \cdot \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x_k}, \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x_k} \right) dx \\ &\geq -D_1 \sum_{k=1}^d \int_{\Omega} (1 + |\mathbf{c}|^q) \left| \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x_k} \right|^2 dx \geq -K \int_{\Omega} (1 + |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|^q) |\nabla \mathbf{c}|^2 dx. \end{aligned}$$

En utilisant la proposition I.2.3 et l'équation (II.15), il vient

$$\varepsilon \Sigma |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \leq \sum_{i=1}^3 \varepsilon \Sigma_i |\Delta c_i^n|_{L^2}^2 \leq \frac{K}{\varepsilon} \int_{\Omega} (1 + |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|^q) |\nabla \mathbf{c}|^2 dx + K |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2} |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}. \quad (\text{II.16})$$

- Si $d = 2$, on utilise

$$\int_{\Omega} |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|^q |\nabla \mathbf{c}|^2 dx \leq |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{\infty}^q |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2.$$

D'après l'hypothèse (I.21), $q < +\infty$ donc il existe $\delta > 0$ tel que $q\delta < 2$ et $H^{1+\delta} \subset L^\infty$. De plus, l'interpolation $H^{1+\delta} = [H^2, H^1]_{1-\delta}$ et les propriétés de régularité de l'opérateur de Laplace entraînent

$$|\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_\infty^q |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 \leq |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{H^{1+\delta}}^q |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 \leq K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{q\delta} |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{q(1-\delta)+2}.$$

Comme la puissance de $|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}$ est inférieure à 2 pour tout $q < +\infty$, en appliquant l'inégalité de Young dans (II.16), on obtient

$$|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \leq K \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{2}{2-q\delta}(q(1-\delta)+2)} \right) |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 + |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2} |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}. \quad (\text{II.17})$$

- Si $d = 3$, en utilisant la régularité elliptique du Laplacien et les inégalités d'Agmon et de Poincaré, on a

$$\int_{\Omega} |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|^q |\nabla \mathbf{c}|^2 dx \leq |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{L^\infty}^q |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 \leq K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{q}{2}} |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{q}{2}+2}.$$

Comme $q < 4$ dans l'hypothèse (I.21) dans le cas tridimensionnel, la puissance de $|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}$ dans l'inégalité précédente est strictement inférieure à 2. Ainsi, en utilisant l'inégalité de Young dans (II.16), il vient

$$|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \leq K \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{2\left(\frac{4+q}{4-q}\right)} \right) |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 + |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2} |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}. \quad (\text{II.18})$$

Finalement, puisque $\mathbf{c} \in L^\infty(0, +\infty, (H^1(\Omega))^3)$ et $\nabla \boldsymbol{\mu} \in L^2(0, +\infty, (L^2(\Omega))^9)$, les membres de droite des estimations (II.17), (II.18) appartiennent à $L^2_{loc}([0, +\infty[)$. Il s'ensuit

$$|\mathbf{c}|_{L^4(0, t_f; H^2)} \leq K(t_f), \quad \forall 0 \leq t_f < +\infty. \quad (\text{II.19})$$

En particulier,

$$|\mathbf{c}|_{L^2(0, t_f; H^2)} \leq k_2(t_f), \quad \forall 0 \leq t_f < +\infty$$

où k_2 est défini par

$$k_2 = C(t_f) k_1. \quad (\text{II.20})$$

2/ Maintenant, montrons que \mathbf{c} appartient à $L^2(0, t_f; (H^3(\Omega))^3)$, quel que soit $t_f > 0$. En effet, prenons le gradient de la définition du potentiel chimique μ_i

$$\frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \nabla \Delta c_i = \nabla \mu_i - \nabla \left(\frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left[\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c})) \right] \right).$$

Ainsi, on a

$$\varepsilon^2 \sum_{i=1}^3 \Sigma_i^2 |\nabla \Delta c_i|_{L^2}^2 \leq K |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 + K \sum_{i=1}^3 |\nabla \partial_i F(\mathbf{c})|_{L^2}^2. \quad (\text{II.21})$$

- Si $d = 2$, grâce à l'hypothèse (I.20), on a

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 |\nabla \partial_i F(\mathbf{c})|_{L^2}^2 &\leq \sum_{i,j=1}^3 |\partial_i \partial_j F(\mathbf{c}) \nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 \leq K \int_{\Omega} (1 + |\mathbf{c}|^{p-2})^2 |\nabla \mathbf{c}|^2 dx \\ &\leq K \left(|\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 + \left| |\mathbf{c}|^{2(p-2)} \right|_{L^{\frac{3}{2}}} \left| |\nabla \mathbf{c}|^2 \right|_{L^3} \right) \\ &\leq K \left(|\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 + |\mathbf{c}|_{L^{3(p-2)}}^{2(p-2)} |\nabla \mathbf{c}|_{L^6}^2 \right). \end{aligned}$$

Comme $2 \leq p < +\infty$ dans l'hypothèse (I.20), on utilise l'injection de Sobolev de $H^1 \subset L^{3(p-2)}$. Par conséquent, il vient

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 |\nabla \partial_i F(\mathbf{c})|_{L^2}^2 &\leq K \left(|\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{2(p-2)} |\nabla \mathbf{c}|_{H^1}^2 \right) \\ &\leq K \left(|\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{2(p-2)} |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \right). \end{aligned} \quad (\text{II.22})$$

Ainsi (II.21) et (II.22) entraînent

$$\varepsilon^2 \sum_{i=1}^3 \Sigma_i^2 |\nabla \Delta c_i|_{L^2}^2 \leq K |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 + K \left(|\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{2(p-2)} |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \right). \quad (\text{II.23})$$

- Si $d = 3$, on utilise l'hypothèse (I.20) avec $p = 6$ et l'inégalité d'Agmon suivante

$$|\nabla \mathbf{c}|_{\infty} \leq K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}},$$

pour obtenir

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 |\nabla \partial_i F(\mathbf{c})|_{L^2}^2 &\leq K \int_{\Omega} (1 + |\mathbf{c}|^{p-2})^2 |\nabla \mathbf{c}|^2 dx \leq K |\nabla \mathbf{c}|_{\infty}^2 \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{2(p-2)}}^{2(p-2)} \right) \\ &\leq K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2} \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{2(p-2)}}^{2(p-2)} \right) = K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2} \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^8}^8 \right). \end{aligned}$$

Grâce à l'injection $H^{\frac{9}{8}} \subset L^8$ et à la propriété d'interpolation $H^{\frac{9}{8}} = [H^2, H^1]_{\frac{7}{8}}$, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 |\nabla \partial_i F(\mathbf{c})|_{L^2}^2 &\leq K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2} \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^7 |\mathbf{c}|_{H^2} \right) \\ &\leq \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{i=1}^3 \Sigma_i^2 |\nabla \Delta c_i|_{L^2}^2 + K |\mathbf{c}|_{H^2}^2 \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{14} |\mathbf{c}|_{H^2}^2 \right). \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

Par conséquent, (II.21) et (II.24) impliquent

$$\frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{i=1}^3 \Sigma_i^2 |\nabla \Delta c_i|_{L^2}^2 \leq K |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 + K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{14} |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \right). \quad (\text{II.25})$$

On remarque que dans (II.23) pour le cas 2D et (II.25) pour le cas 3D, la puissance du terme $|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}$ est inférieure ou égale à 4. Ainsi, en utilisant les estimations (II.10), (II.13), (II.19), il vient

$$|\mathbf{c}|_{L^2(0,t_f;H^3)} \leq K(t_f), \quad \forall 0 \leq t_f < +\infty. \quad (\text{II.26})$$

Etape 6 : Unicité des solutions faibles

1/ On suppose qu'il existe deux solutions faibles (c_i, μ_i) et (d_i, ν_i) pour $i = 1, 2, 3$ au problème (I.10) avec la même donnée initiale. En notant $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)$ et $\mathbf{d} = (d_1, d_2, d_3)$, on a pour tout $\varphi \in H_n^1$,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} (c_i - d_i), \varphi \right) = - \frac{1}{\Sigma_i} \int_{\Omega} (M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i - M_0(\mathbf{d}) \nabla \nu_i) \cdot \nabla \varphi dx. \quad (\text{II.27})$$

Prenons $\varphi = \varepsilon \Sigma_i (c_i - d_i)$ comme fonction test et sommons les équations sur i , il vient alors

$$\begin{aligned}
 & \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |c_i - d_i|_{L^2}^2 \right) \\
 &= -\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} (M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i - M_0(\mathbf{d}) \nabla \nu_i) \cdot \nabla (c_i - d_i) dx \\
 &= -\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} M_0(\mathbf{d}) \nabla (\mu_i - \nu_i) \cdot \nabla (c_i - d_i) dx - \varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} (M_0(\mathbf{c}) - M_0(\mathbf{d})) \nabla \mu_i \cdot \nabla (c_i - d_i) dx \\
 &= \underbrace{\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} M_0(\mathbf{d}) (\mu_i - \nu_i) \Delta (c_i - d_i) dx}_{U_1} \\
 &\quad + \underbrace{\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} (\mu_i - \nu_i) \nabla M_0(\mathbf{d}) \cdot \nabla (c_i - d_i) dx}_{U_2} \\
 &\quad - \underbrace{\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} (M_0(\mathbf{c}) - M_0(\mathbf{d})) \nabla \mu_i \cdot \nabla (c_i - d_i) dx}_{U_3}.
 \end{aligned} \tag{II.28}$$

Dans le cas de la dimension 3, seul le terme U_1 sera traité puisqu'on suppose que la mobilité est constante (les termes U_2 et U_3 sont donc nuls).

2/ Estimation de U_1 :

En utilisant tout d'abord les définitions de μ_i et de ν_i et en remarquant que $\sum_{i=1}^3 \Delta (c_i - d_i) = 0$, on a

$$U_1 = -\frac{3}{4} \varepsilon^2 \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} M_0(\mathbf{d}) \Sigma_i |\Delta (c_i - d_i)|^2 dx + 12 \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} M_0(\mathbf{d}) (\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_i F(\mathbf{d})) \Delta (c_i - d_i) dx.$$

D'après les hypothèses (I.20), (I.22) et (I.24) et en utilisant l'inégalité de Young et la proposition I.2.3, il vient

$$\begin{aligned}
 U_1 + K \underline{\Sigma} \varepsilon^2 \sum_{i=1}^3 |\Delta (c_i - d_i)|_{L^2}^2 &\leq K \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_i F(\mathbf{d})|^2 dx \\
 &\leq K \int_{\Omega} \left(1 + |\mathbf{c}|^{2(p-2)} + |\mathbf{d}|^{2(p-2)} \right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|^2 dx \leq K \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{2(p-2)}}^{2(p-2)} + |\mathbf{d}|_{L^{2(p-2)}}^{2(p-2)} \right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^\infty}^2.
 \end{aligned}$$

- Dans le cas de la dimension 2, on utilise une fois de plus l'inégalité de Young et la relation

$$|\mathbf{c} - \mathbf{d}|_\infty^2 \leq K |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2} |\Delta (\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2},$$

pour avoir

$$U_1 + \frac{1}{2} K \underline{\Sigma} \varepsilon^2 |\Delta (\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 \leq K \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{2(p-2)}}^{4(p-2)} + |\mathbf{d}|_{L^{2(p-2)}}^{4(p-2)} \right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2.$$

Comme $2 < p < +\infty$ dans l'hypothèse (I.20), H^1 s'injecte dans $L^{2(p-2)}$ et finalement on a

$$U_1 + \frac{1}{2}K\underline{\Sigma}\varepsilon^2|\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 \leq K_1 \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{4(p-2)} + |\mathbf{d}|_{H^1}^{4(p-2)} \right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2. \quad (\text{II.29})$$

- Dans le cas de la dimension 3, les inégalités d'Agmon et de Young impliquent

$$\begin{aligned} U_1 + \frac{1}{2}K\underline{\Sigma}\varepsilon^2|\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 &\leq K_1 \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{2(p-2)}}^{8(p-2)} + |\mathbf{d}|_{L^{2(p-2)}}^{8(p-2)} \right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2 \\ &= K_1 \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^8}^{32} + |\mathbf{d}|_{L^8}^{32} \right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2, \end{aligned}$$

car on suppose $p = 6$ dans (I.20) quand $d = 3$. L'injection de $H^{\frac{9}{8}} \subset L^8$ et la propriété d'interpolation $H^{\frac{9}{8}} = [H^3, H^1]_{\frac{15}{16}}$ entraînent

$$|\mathbf{c}|_{L^8}^{32} \leq K |\mathbf{c}|_{H^1}^{30} |\mathbf{c}|_{H^3}^2.$$

Finalement, il suit que

$$U_1 + \frac{1}{2}K\underline{\Sigma}\varepsilon^2|\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 \leq K_1 \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{30} |\mathbf{c}|_{H^3}^2 + |\mathbf{d}|_{H^1}^{30} |\mathbf{d}|_{H^3}^2 \right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2. \quad (\text{II.30})$$

3/ Estimation de U_2 dans le cas où $d = 2$:

D'après l'hypothèse (I.23) sur la mobilité, on peut écrire

$$|U_2| \leq M_3 \varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{d}| |\mu_i - \nu_i| |\nabla(c_i - d_i)| dx.$$

En utilisant les définitions de μ_i et ν_i et en notant que $\sum_{i=1}^3 \nabla(c_i - d_i) = 0$, il vient

$$\begin{aligned} |U_2| &\leq \underbrace{\frac{3}{4}M_3\varepsilon^2 \sum_{i=1}^3 |\Sigma_i| \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{d}| |\Delta(c_i - d_i)| |\nabla(c_i - d_i)| dx}_{U'_2} \\ &\quad + \underbrace{12M_3 \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{d}| |\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_i F(\mathbf{d})| |\nabla(c_i - d_i)| dx}_{U''_2}. \quad (\text{II.31}) \end{aligned}$$

Pour estimer le terme U'_2 , on utilise l'interpolation $H^1 = [H^2, L^2]_{\frac{1}{2}}$ et l'inégalité d'Agmon en dimension 2. Ainsi on a

$$\begin{aligned} |U'_2| &\leq K\varepsilon^2 |\nabla \mathbf{d}|_{\infty} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} \\ &\leq K\varepsilon^2 |\nabla \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta \nabla \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{3}{2}} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \frac{K\underline{\Sigma}\varepsilon^2}{8} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 + K_2 |\nabla \mathbf{d}|_{L^2}^2 |\Delta \nabla \mathbf{d}|_{L^2}^2 |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (\text{II.32})$$

De la même manière, on estime le terme U_2'' , en utilisant en plus l'hypothèse (I.20) sur les dérivées secondes de F

$$\begin{aligned}
 |U_2''| &\leq K \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{d}| \left(1 + |\mathbf{c}|^{p-2} + |\mathbf{d}|^{p-2}\right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}| |\nabla(c_i - d_i)| dx \\
 &\leq K |\nabla \mathbf{d}|_{L^4} \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{4(p-2)}}^{p-2} + |\mathbf{d}|_{L^{4(p-2)}}^{p-2}\right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{\infty} |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} \\
 &\leq K |\nabla \mathbf{d}|_{L^4} \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{4(p-2)}}^{p-2} + |\mathbf{d}|_{L^{4(p-2)}}^{p-2}\right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \\
 &\leq K |\nabla \mathbf{d}|_{L^4} \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{4(p-2)}}^{p-2} + |\mathbf{d}|_{L^{4(p-2)}}^{p-2}\right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} \\
 &\leq \frac{K \underline{\Sigma} \varepsilon^2}{8} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 + K |\nabla \mathbf{d}|_{L^4}^2 \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{4(p-2)}}^{2(p-2)} + |\mathbf{d}|_{L^{4(p-2)}}^{2(p-2)}\right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2.
 \end{aligned}$$

Comme $2 < p < +\infty$ dans l'hypothèse (I.20) alors H^1 s'injecte dans $L^{2(p-2)}$ en dimension 2 et grâce aux propriétés de régularité du Laplacien, il vient

$$|U_2''| \leq \frac{K \underline{\Sigma} \varepsilon^2}{8} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 + K_3 |\Delta \mathbf{d}|_{L^2}^2 \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{2(p-2)} + |\mathbf{d}|_{H^1}^{2(p-2)}\right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2. \quad (\text{II.33})$$

4/ Estimation de U_3 dans le cas où $d = 2$:

On utilise une fois de plus les inégalités d'Agmon et l'interpolation $H^1 = [H^2, L^2]_{\frac{1}{2}}$ pour estimer U_3

$$\begin{aligned}
 |U_3| &\leq K |DM_0|_{\infty} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{\infty} |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2} |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} \\
 &\leq K M_3 |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2} \\
 &\leq K |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2} \\
 &\leq \frac{K \underline{\Sigma} \varepsilon^2}{4} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 + K_4 |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2.
 \end{aligned} \quad (\text{II.34})$$

5/ Unicité des solutions faibles dans le cas où $d = 2$:

Pour prouver l'unicité, nous introduisons

$$y(t) = \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |c_i - d_i|_{L^2}^2.$$

L'équation (II.28) et les estimations (II.29), (II.32), (II.33), et (II.34) impliquent l'inégalité différentielle

$$y'(t) \leq a(t) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2$$

où a est définie par

$$\begin{aligned}
 a(t) &= K_1 \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{4(p-2)} + |\mathbf{d}|_{H^1}^{4(p-2)}\right) + K_2 |\nabla \mathbf{d}|_{L^2}^2 |\Delta \nabla \mathbf{d}|_{L^2}^2 \\
 &\quad + K_3 |\Delta \mathbf{d}|_{L^2}^2 \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{2(p-2)} + |\mathbf{d}|_{H^1}^{2(p-2)}\right) + K_4 |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2. \quad (\text{II.35})
 \end{aligned}$$

En utilisant maintenant la proposition I.2.3 (et puisque $\sum_{i=1}^3 (c_i - d_i) = 0$) on déduit que y est une fonction positive et que

$$y'(t) \leq \frac{2}{\underline{\Sigma} \varepsilon} a(t) y(t).$$

Grâce aux propriétés de régularité (II.1) des solutions \mathbf{c} et \mathbf{d} , la fonction a appartient à $L^1(0, t_f)$ quel que soit $t_f > 0$. En appliquant le lemme de Gronwall, il vient

$$y(t) \leq y(0)e^{\int_0^t a(s)ds} \quad \forall 0 \leq t < t_f.$$

Comme les deux solutions ont les mêmes données initiales, $y(t) = 0$ pour tout $t > 0$. Par conséquent, on a montré l'unicité des solutions faibles en dimension 2.

6/ Unicité des solutions faibles pour $d = 3$:

D'après l'équation (II.28) et l'estimation (II.30), on a

$$y'(t) \leq a(t)|\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2,$$

où a est définie par

$$a(t) = K_1 \left[1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{30} |\mathbf{c}|_{H^3}^2 + |\mathbf{d}|_{H^1}^{30} |\mathbf{d}|_{H^3}^2 \right].$$

Grâce aux propriétés de régularité (II.1) des solutions \mathbf{c} et \mathbf{d} , la fonction a appartient à $L^1(0, t_f)$ quel que soit $t_f > 0$. On peut donc conclure sur l'unicité des solutions comme dans le cas 2D. ■

II.2 Théorème d'existence et d'unicité des solutions fortes

Dans ce paragraphe, on établit l'existence (locale en dimension 3) de solutions plus régulières. Ceci nous permettra, en particulier, de prouver l'unicité d'une telle solution en dimension 3 dans le cas d'une mobilité variable non dégénérée. Par ailleurs, l'existence de telles solutions régulières permettra l'étude de la stabilité asymptotique des états métastables dans le paragraphe suivant.

Pour avoir l'existence de solutions fortes, il faut que la donnée initiale soit plus régulière que dans le théorème I.2.7 ainsi que la non-linéarité de F dont on demande dorénavant qu'elle vérifie

$$|D^3 F(\mathbf{c})| \leq B_3(1 + |\mathbf{c}|^r) \quad (\text{II.36})$$

où $r < +\infty$ si $d = 2$ et $r < 3$ si $d = 3$. En particulier, cette hypothèse n'est pas vérifiée pour le potentiel de Cahn-Hilliard $F = F_{\Lambda, \alpha}$ en 3D.

Théorème II.2.1 (Existence et unicité des solutions fortes)

On suppose que les conditions (I.14), (I.15) et les hypothèses (I.17)-(I.23) et (II.36) sont vérifiées. Quel que soit $\mathbf{c}^0 \in (H^2(\Omega))^3 \cap \mathbb{H}_S^1(\Omega)$, il existe $t_f > 0$ et une unique solution forte $(\mathbf{c}, \boldsymbol{\mu})$ de (I.10) sur $[0, t_f]$ dont \mathbf{c}^0 est la donnée initiale telle que

$$\mathbf{c} \in L^\infty(0, t_f; (H^2(\Omega))^3) \cap L_{loc}^2(0, t_f; (H^4(\Omega))^3) \cap C^0([0, t_f]; (H^2(\Omega))^3), \quad (\text{II.37})$$

$$\boldsymbol{\mu} \in L^2(0, t_f; (H^2(\Omega))^3) \quad (\text{II.38})$$

où $t_f = +\infty$ si $d = 2$ et $t_f < +\infty$ si $d = 3$.

En particulier, la solution appartient à $C^0([0, t_f]; (H^2(\Omega))^3)$ et d'après les injections de Sobolev, elle est continue sur $\bar{\Omega} \times [0, t_f]$. Cette propriété sera utilisée notamment pour la preuve du théorème de stabilité des états métastables dans le paragraphe II.3.

Preuve.

Nous allons tout d'abord montrer l'existence des solutions fortes en utilisant la même approximation de Galerkin que dans le paragraphe II.1. Puis grâce aux propriétés de régularité obtenues pour la solution, nous démontrons l'unicité des solutions fortes en dimension 3.

Pour simplifier les notations, les fonctions \mathbf{c}^n et $\boldsymbol{\mu}^n$ sont notées respectivement \mathbf{c} et $\boldsymbol{\mu}$.

Etape 1 : Existence des solutions fortes

Prenons $\varepsilon \Sigma_i \Delta^2 c_i$ comme fonction test dans l'équation (II.3)

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} \frac{d}{dt} (|\Delta c_i|_{L^2}^2) &= - \int_{\Omega} \varepsilon M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot \nabla (\Delta^2 c_i) dx \\ &= \int_{\Omega} \varepsilon \nabla \cdot (M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i) \Delta^2 c_i dx \\ &= \int_{\Omega} \varepsilon M_0(\mathbf{c}) \Delta \mu_i \Delta^2 c_i dx + \int_{\Omega} \varepsilon \nabla M_0(\mathbf{c}) \cdot \nabla \mu_i \Delta^2 c_i dx. \end{aligned}$$

En sommant les équations sur i , on obtient

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} \frac{d}{dt} (|\Delta c_i|_{L^2}^2) = \underbrace{\sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \varepsilon M_0(\mathbf{c}) \Delta \mu_i \Delta^2 c_i dx}_{E_1} + \underbrace{\sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \varepsilon \nabla M_0(\mathbf{c}) \cdot \nabla \mu_i \Delta^2 c_i dx}_{E_2}. \quad (\text{II.39})$$

1/ Commençons par estimer le terme E_1 . Pour cela, on utilise la définition de μ_i et en remarquant que $\sum_{i=1}^3 \Delta^2 c_i = 0$ on a

$$E_1 \leq - \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i M_0(\mathbf{c}) |\Delta^2 c_i|_{L^2}^2 + \sum_{i=1}^3 12 M_0(\mathbf{c}) \int_{\Omega} \Delta(\partial_i F(\mathbf{c})) \Delta^2 c_i dx.$$

Grâce à la proposition I.2.3 et à l'hypothèse (I.22) sur la mobilité, il vient

$$E_1 + K \varepsilon^2 \Sigma |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 \leq K \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\Delta \partial_i F(\mathbf{c})|^2 dx. \quad (\text{II.40})$$

Pour estimer le terme de droite de l'inégalité précédente, on a besoin des hypothèses (I.20) et (II.36) sur la fonction F

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\Delta \partial_i F(\mathbf{c})|^2 dx &\leq |D^3 F(\mathbf{c})|_{\infty}^2 |\nabla \mathbf{c}|_{L^4}^4 + |D^2 F(\mathbf{c})|_{\infty}^2 |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \\ &\leq K \left(1 + |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{\infty}^{2r}\right) |\nabla \mathbf{c}|_{L^4}^4 + K \left(1 + |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{\infty}^{2r+2}\right) |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (\text{II.41})$$

- Si $d = 2$, posons $\delta > 0$ tel que $\delta < \frac{2}{r+1}$. En utilisant l'injection de $H^{1+\delta} \subset L^{\infty}$ et l'interpolation $H^{1+\delta} = [H^4, H^1]_{1-\frac{\delta}{3}}$, il vient

$$|\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{\infty} \leq K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{1-\frac{\delta}{3}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{\delta}{3}}.$$

De plus, l'injection de $H^{\frac{1}{2}} \subset L^4$ et l'interpolation $H^{\frac{1}{2}} = [H^3, L^2]_{\frac{5}{6}}$ donne

$$|\nabla \mathbf{c}|_{L^4} = |\nabla(\mathbf{c} - m(\mathbf{c}))|_{L^4} \leq K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{5}{6}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{6}}.$$

Enfin pour le terme $|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}$, les propriétés de régularité du Laplacien et l'interpolation de $H^2 = [H^4, H^1]_{\frac{2}{3}}$ entraînent

$$|\Delta \mathbf{c}|_{L^2} \leq K |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{H^2} \leq K |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{H^1}^{\frac{2}{3}} |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{H^4}^{\frac{1}{3}} \leq K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{2}{3}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{3}}. \quad (\text{II.42})$$

Finalement, en utilisant les trois estimations précédentes dans (II.41), il vient

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\Delta \partial_i F(\mathbf{c})|^2 dx &\leq K \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{2r(1-\frac{\delta}{3})} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{2r\delta}{3}} \right) |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{10}{3}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{2}{3}} \\ &\quad + K \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{(2r+2)(1-\frac{\delta}{3})} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{\delta}{3}(2r+2)} \right) |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{4}{3}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{2}{3}}. \end{aligned} \quad (\text{II.43})$$

On remarque dans l'estimation (II.43) que toutes les puissances de $|\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}$ sont inférieures à 2 car $\delta < \frac{2}{r+1}$. En appliquant l'inégalité de Young, les estimations (II.40) et (II.43) impliquent

$$\begin{aligned} E_1 + \frac{K\varepsilon^2 \Sigma}{2} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 &\leq K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^5 (1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\alpha_1}) + K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 (1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\alpha_2}) \\ &\leq K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^5 (1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\alpha}) \end{aligned} \quad (\text{II.44})$$

où α est un exposant qui dépend de r et de δ .

- Si $d = 3$, on utilise l'inégalité d'Agmon, l'interpolation $H^2 = [H^4, H^1]_{\frac{2}{3}}$ et les propriétés de régularité du Laplacien pour avoir

$$|\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{\infty} \leq |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{H^1}^{\frac{1}{2}} |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{H^2}^{\frac{1}{2}} \leq K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{3}} |\mathbf{c}|_{H^4}^{\frac{1}{6}} \leq |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{5}{6}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{6}}.$$

Pour le terme $|\nabla \mathbf{c}|_{L^4}$, on utilise l'injection de $H^{\frac{3}{4}} \subset L^4$ et l'interpolation $H^{\frac{3}{4}} = [H^3, L^2]_{\frac{3}{4}}$

$$|\nabla \mathbf{c}|_{L^4} \leq K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{3}{4}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{4}}.$$

Finalement, en utilisant les estimations précédentes et (II.42) dans l'inégalité (II.40), il vient

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\Delta \partial_i F(\mathbf{c})|^2 dx &\leq K \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{5r}{3}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{r}{3}} \right) |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^3 |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2} \\ &\quad + K \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{5(r+1)}{3}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{r+1}{3}} \right) |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{4}{3}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{2}{3}}. \end{aligned} \quad (\text{II.45})$$

Dans l'estimation précédente, toutes les puissances de $|\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}$ sont inférieures à 2 puisque $r < 3$ d'après l'hypothèse (II.36) sur $D^3 F$. En appliquant l'inégalité de Young et grâce aux estimations (II.40) et (II.45), on a

$$\begin{aligned} E_1 + \frac{K\varepsilon^2 \Sigma}{2} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 &\leq K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^6 \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\beta_1} \right) + K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\beta_2} \right) \\ &\leq K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^6 \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\beta} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.46})$$

où β est un exposant qui dépend de r .

2/ Il faut maintenant estimer le terme E_2 dans l'inégalité (II.39).

- Si $d = 2$, la définition de μ_i , l'estimation (II.43) et les propriétés de régularité (II.1) de la solution entraînent

$$|\Delta \mu_i|_{L^2}^2 \leq K |\Delta^2 c_i|_{L^2}^2 + K \sum_{i=1}^3 |\Delta \partial_i F(\mathbf{c})|_{L^2}^2 \leq K \left(1 + |\Delta^2 c_i|_{L^2}^2 \right). \quad (\text{II.47})$$

De plus, l'hypothèse (I.23) sur la mobilité, l'injection de $H^{\frac{1}{2}} \subset L^4$ et la propriété d'interpolation $H^{\frac{1}{2}} = [H^1, L^2]_{\frac{1}{2}}$ permettent d'obtenir

$$E_2 \leq M_3 \varepsilon |\nabla \mathbf{c}|_{L^4} |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^4} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2} \leq M_3 \varepsilon |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}.$$

Ainsi grâce à l'estimation (II.47) et en appliquant l'inégalité de Young, il vient

$$E_2 \leq \frac{K \varepsilon^2 \underline{\Sigma}}{8} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 + K |\nabla \mathbf{c}|_{L^2} |\Delta \mathbf{c}|_{L^2} |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2} (1 + |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}).$$

Finalement, en appliquant l'inégalité de Young sur les derniers termes de l'estimation précédente, on obtient

$$E_2 \leq \frac{K \varepsilon^2 \underline{\Sigma}}{4} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 + K \left(|\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 + |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \right). \quad (\text{II.48})$$

- Dans le cas tridimensionnel, on utilise l'hypothèse (I.23), la définition de μ_i en remarquant que $\sum_{i=1}^3 \Delta^2 c_i = 0$ pour avoir

$$\begin{aligned} E_2 &\leq M_3 \varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \nabla \mathbf{c} \nabla \mu_i \Delta^2 c_i \, dx \\ &\leq \frac{3}{4} \varepsilon^2 M_3 \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \Sigma_i |\nabla \mathbf{c}| |\Delta^2 c_i| |\nabla \Delta c_i| \, dx + 12 M_3 \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{c}| |\Delta^2 c_i| |\nabla (\partial_i F(\mathbf{c}))| \, dx \\ &\leq K \varepsilon^2 |\nabla \mathbf{c}|_{\infty} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2} + K |D^2 F(\mathbf{c})|_{L^2} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2} |\nabla \mathbf{c}|_{\infty}^2. \end{aligned}$$

Grâce aux inégalités d'Agmon, aux propriétés de régularité de l'opérateur Laplacien et à l'interpolation de $H^1 = [H^2, L^2]_{\frac{1}{2}}$, on obtient les inégalités suivantes

$$\begin{aligned} |\nabla \mathbf{c}|_{\infty} &\leq |\nabla(\mathbf{c} - m(\mathbf{c}))|_{H^1}^{\frac{1}{2}} |\nabla(\mathbf{c} - m(\mathbf{c}))|_{H^2}^{\frac{1}{2}} \leq |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}}, \\ |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2} &\leq |\Delta \mathbf{c}|_{H^1} \leq |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta \mathbf{c}|_{H^2}^{\frac{1}{2}} \leq |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

qui permettent d'écrire, en utilisant l'hypothèse (I.20),

$$\begin{aligned} E_2 &\leq K \varepsilon^2 |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{3}{2}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2} + K \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{2(r+1)}}^{r+1} \right) |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2} |\Delta \mathbf{c}|_{L^2} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2} \\ &\leq K \varepsilon^2 |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{5}{4}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{7}{4}} + K \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{2(r+1)}}^{r+1} \right) |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2} |\Delta \mathbf{c}|_{L^2} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2}. \end{aligned}$$

On utilise une fois de plus l'inégalité de Young afin d'avoir

$$E_2 \leq \frac{K \varepsilon^2 \underline{\Sigma}}{2} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 + K \left(|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{10} + \left(1 + |\mathbf{c}|_{L^{2r+2}}^{2r+2} \right) |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \right).$$

Comme $r < 3$ dans l'hypothèse (II.36), l'injection de $H^2 \subset L^8$ entraîne

$$E_2 \leq \frac{K \varepsilon^2 \underline{\Sigma}}{2} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 + K \left(|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{10} + \left(1 + |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^8 \right) |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2 \right).$$

Enfin, l'interpolation $H^3 = [H^4, H^2]_{\frac{1}{2}}$ et l'inégalité de Young impliquent

$$\begin{aligned} E_2 &\leq \frac{K \varepsilon^2 \underline{\Sigma}}{4} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 + K \left(|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{10} + |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^6 + |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{22} \right) \\ &\leq \frac{K \varepsilon^2 \underline{\Sigma}}{4} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 + K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{22}. \end{aligned} \quad (\text{II.49})$$

3/ Grâce aux estimations des termes E_1 et E_2 obtenues, nous allons montrer que

$$c_i \in L^\infty(0, t_f; H^2) \cap L^2_{loc}(0, t_f; H^4) \text{ avec } t_f = +\infty \text{ si } d = 2 \text{ et } t_f < +\infty \text{ si } d = 3.$$

- Si $d = 2$, nous allons utiliser le lemme de Gronwall uniforme. D'après les estimations (II.44) et (II.48), nous avons

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} \frac{d}{dt} (|\Delta c_i|_{L^2}^2) + \frac{K \varepsilon^2 \underline{\Sigma}}{4} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 \\ & \leq K_1 \left(|\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^5 (1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^\alpha) + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 \right) + K_2 \left(|\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 \right) |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (\text{II.50})$$

En posant

$$\begin{aligned} y(t) &= \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |\Delta c_i|_{L^2}^2, \\ a(t) &= K_1 \left(|\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^5 (1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^\alpha) + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 \right), \\ b(t) &= \frac{2K_2 \varepsilon}{\underline{\Sigma}} \left(|\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^2 |\nabla \boldsymbol{\mu}|_{L^2}^2 \right), \end{aligned}$$

et en utilisant la proposition I.2.3, la fonction y est positive et vérifie pour presque tout $t > 0$

$$y'(t) \leq a(t) + b(t)y(t).$$

D'après les estimations (II.10), (II.13) et (II.19), les fonctions y , a , b vérifient les hypothèses du lemme de Gronwall uniforme

$$\begin{aligned} \int_t^{t+1} y(s) ds &\leq k_2^2, \\ \int_t^{t+1} a(s) ds &\leq k_1^5 (1 + k_1^\alpha) + k_1^2, \\ \int_t^{t+1} b(s) ds &\leq k_1^2 + k_1^4, \end{aligned}$$

où on pose

$$k_3 = k_1^5 (1 + k_1^\alpha) + k_1^2 \quad \text{et} \quad k_4 = k_1^2 + k_1^4, \quad (\text{II.51})$$

avec k_1 et k_2 définis respectivement par (II.9) et (II.20). Finalement, en appliquant le lemme de Gronwall uniforme, il vient

$$y(t) \leq (\max(y(0), k_2^2) + k_3) e^{k_4 t}. \quad (\text{II.52})$$

D'autre part, on a

$$y(0) \leq \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |\Delta c_i^n(0)|_{L^2}^2 \leq \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |\Delta c_i^0|_{L^2}^2 = k_5 < +\infty \quad (\text{II.53})$$

car $\mathbf{c}^0 \in (H^2(\Omega))^3$. D'après (II.50), on déduit que

$$|\Delta \mathbf{c}|_{L^\infty(0, \infty; L^2)} \leq K \quad (\text{II.54})$$

et

$$|\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{L^2(0, t_f; H^4)} \leq K \quad \forall 0 < t_f < +\infty. \quad (\text{II.55})$$

- Dans le cas 3D, les estimations (II.46) et (II.49) impliquent

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} \frac{d}{dt} (|\Delta c_i|_{L^2}^2) + \frac{K \varepsilon^2 \underline{\Sigma}}{4} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^2 \leq K_1 |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^6 \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^\beta\right) + K_2 |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{22}. \quad (\text{II.56})$$

En posant

$$\begin{aligned} y(t) &= \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |\Delta c_i|_{L^2}^2, \\ a(t) &= K_1 |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^6 \left(1 + |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^\beta\right), \end{aligned}$$

et grâce à la proposition I.2.3, l'équation (II.56) s'écrit

$$y'(t) + \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon^2 \underline{\Sigma}}{4} |\Delta^2 c_i|_{L^2}^2 \leq a(t) + k y^{11}(t) \quad (\text{II.57})$$

où $k = K_2 \left(\frac{2\varepsilon}{\underline{\Sigma}}\right)^{11}$.

Grâce aux propriétés de régularité (II.1) sur les solutions faibles, la fonction a appartient à $L^\infty(0, t_f)$. Finalement, grâce à un argument de comparaison sur les équations différentielles ordinaires, on en déduit qu'il existe un temps t_M fini tel que y est bornée sur l'intervalle $[0, t_M]$. Par conséquent, (II.57) implique que pour tout $t_f < t_M$

$$\mathbf{c} \in L^\infty(0, t_f; (H^2)^3) \cap L_{loc}^2(0, t_f; (H^4)^3).$$

4/ La fonction \mathbf{c} est solution de (I.10), elle vérifie donc des estimations similaires à (II.14). Par conséquent, on en déduit que

$$\frac{d\mathbf{c}}{dt} \in L_{loc}^2(0, t_f; (L^2(\Omega))^3),$$

et d'après le théorème d'Aubin-Lions-Simon (annexe B),

$$\mathbf{c} \in \mathcal{C}^0([0, t_f]; (H^2(\Omega))^3).$$

Ceci permet de conclure sur les propriétés de régularité (II.37)-(II.38) du théorème.

Etape 2 : Unicité des solutions fortes

Grâce à la régularité supplémentaire obtenue pour les solutions fortes, nous allons montrer l'unicité des solutions pour $d = 3$ avec la mobilité vérifiant seulement les hypothèses (I.22)-(I.23).

1/ Nous reprenons la même démarche que pour la preuve de l'unicité des solutions faibles. On suppose qu'il existe deux solutions fortes (c_i, μ_i) et (d_i, ν_i) pour $i = 1, 2, 3$ au problème (I.10) avec la même donnée initiale. Prenons $\varphi = \varepsilon \Sigma_i (c_i - d_i)$ comme fonction test dans (II.27) et sommons

les équations sur i ,

$$\begin{aligned}
 & \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |c_i - d_i|_{L^2}^2 \right) \\
 &= -\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} (M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i - M_0(\mathbf{d}) \nabla \nu_i) \cdot \nabla (c_i - d_i) dx \\
 &= -\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} M_0(\mathbf{d}) \nabla (\mu_i - \nu_i) \cdot \nabla (c_i - d_i) dx - \varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} (M_0(\mathbf{c}) - M_0(\mathbf{d})) \nabla \mu_i \cdot \nabla (c_i - d_i) dx \\
 &= \underbrace{\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} M_0(\mathbf{d}) (\mu_i - \nu_i) \Delta (c_i - d_i) dx}_{U_1} \\
 &\quad + \underbrace{\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} (\mu_i - \nu_i) \nabla M_0(\mathbf{d}) \cdot \nabla (c_i - d_i) dx}_{U_2} \\
 &\quad - \underbrace{\varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} (M_0(\mathbf{c}) - M_0(\mathbf{d})) \nabla \mu_i \cdot \nabla (c_i - d_i) dx}_{U_3}.
 \end{aligned} \tag{II.58}$$

L'estimation du terme U_1 est identique à (II.30) faite dans la preuve du théorème I.2.7

$$U_1 + \frac{1}{2} K \underline{\Sigma} \varepsilon^2 |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 \leq K_1 \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{30} |\mathbf{c}|_{H^3}^2 + |\mathbf{d}|_{H^1}^{30} |\mathbf{d}|_{H^3}^2 \right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2.$$

2/ Estimation de U_2 :

Nous utilisons l'estimation (II.31) sur U_2 obtenue pour $d = 2$

$$\begin{aligned}
 |U_2| &\leq \underbrace{\frac{3}{4} M_3 \varepsilon^2 \sum_{i=1}^3 |\Sigma_i| \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{d}| |\Delta(c_i - d_i)| |\nabla(c_i - d_i)| dx}_{U'_2} \\
 &\quad + \underbrace{12 M_3 \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{d}| |\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_i F(\mathbf{d})| |\nabla(c_i - d_i)| dx}_{U''_2}.
 \end{aligned}$$

Pour estimer le terme U'_2 , on utilise l'interpolation $H^1 = [H^2, L^2]_{\frac{1}{2}}$ et l'inégalité d'Agmon suivante

$$|\mathbf{c}|_{\infty} \leq K |\mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\mathbf{c}|_{H^3}^{\frac{1}{2}}.$$

On obtient alors

$$|U'_2| \leq K \varepsilon^2 |\nabla \mathbf{d}|_{\infty} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} \leq K \varepsilon^2 |\nabla \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta^2 \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{3}{2}}.$$

Finalement, en appliquant l'inégalité de Young, il vient

$$|U'_2| \leq \frac{K \underline{\Sigma} \varepsilon^2}{8} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 + K_2 |\nabla \mathbf{d}|_{L^2}^2 |\Delta^2 \mathbf{d}|_{L^2}^2 |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2. \tag{II.59}$$

Pour estimer le terme U_2'' , on utilise l'injection de H^2 dans L^∞ , les inégalités d'Agmon et l'interpolation $H^1 = [H^2, L^2]_{\frac{1}{2}}$

$$\begin{aligned} |U_2''| &\leq K \left(1 + |\mathbf{c}|_\infty^{r+1} + |\mathbf{d}|_\infty^{r+1}\right) |\nabla \mathbf{d}|_{L^2} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_\infty |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} \\ &\leq K \left(1 + |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{r+1} + |\Delta \mathbf{d}|_{L^2}^{r+1}\right) |\nabla \mathbf{d}|_{L^2} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{4}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{3}{4}} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \\ &\leq K \left(1 + |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{r+1} + |\Delta \mathbf{d}|_{L^2}^{r+1}\right) |\nabla \mathbf{d}|_{L^2} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{3}{4}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{5}{4}}. \end{aligned}$$

Enfin, en appliquant l'inégalité de Young, il vient

$$|U_2''| \leq \frac{K \underline{\Sigma} \varepsilon^2}{8} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 + K_3 |\nabla \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{8}{3}} \left(1 + |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{8(r+1)}{3}} + |\Delta \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{8(r+1)}{3}}\right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2. \quad (\text{II.60})$$

3/ Estimation de U_3 :

Nous utilisons l'hypothèse (I.23) sur la mobilité pour avoir

$$\begin{aligned} |U_3| &\leq \varepsilon \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |M_0(\mathbf{c}) - M_0(\mathbf{d})| |\nabla \mu_i| |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})| dx \\ &\leq \varepsilon \sum_{i=1}^3 |DM_0|_\infty \int_{\Omega} |\mathbf{c} - \mathbf{d}| |\nabla \mu_i| |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})| dx \\ &\leq \varepsilon M_3 \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\mathbf{c} - \mathbf{d}| |\nabla \mu_i| |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})| dx. \end{aligned}$$

En utilisant la définition de μ_i et en notant que $\sum_{i=1}^3 \nabla(c_i - d_i) = 0$, il vient

$$|U_3| \leq \frac{3}{4} K \varepsilon^2 M_3 \int_{\Omega} |\mathbf{c} - \mathbf{d}| |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})| |\nabla \Delta \mathbf{c}| dx + \sum_{i=1}^3 12 M_3 \int_{\Omega} |\nabla \partial_i F(\mathbf{c})| |\mathbf{c} - \mathbf{d}| |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})| dx.$$

L'hypothèse (I.20) implique

$$\begin{aligned} |U_3| &\leq K \varepsilon^2 \int_{\Omega} |\mathbf{c} - \mathbf{d}| |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})| |\nabla \Delta \mathbf{c}| dx + K \int_{\Omega} |D^2 F(\mathbf{c})| |\nabla \mathbf{c}| |\mathbf{c} - \mathbf{d}| |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})| dx \\ &\leq \underbrace{K \varepsilon^2 |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_\infty |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2} |\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2}}_{U_3'} + \underbrace{K \left(1 + |\mathbf{c}|_\infty^{r+1}\right) |\nabla \mathbf{c}|_{L^2} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_\infty |\nabla(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}}_{U_3''}. \end{aligned} \quad (\text{II.61})$$

Le terme U_3'' s'estime comme le terme U_2'' dans (II.60)

$$|U_3''| \leq \frac{K \underline{\Sigma} \varepsilon^2}{8} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 + K_4 |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{8}{3}} \left(1 + |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{8(r+1)}{3}}\right) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2. \quad (\text{II.62})$$

Pour estimer U_3' , on utilise l'inégalité d'Agmon et l'inégalité suivante

$$|\nabla \Delta \mathbf{c}|_{L^2} \leq K |\Delta \mathbf{c}|_{H^1} \leq K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta \mathbf{c}|_{H^2}^{\frac{1}{2}} \leq K |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}},$$

pour avoir

$$\begin{aligned} |U'_3| &\leq K\varepsilon^2 |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{4}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{3}{4}} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \\ &\leq K\varepsilon^2 |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{3}{4}} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^{\frac{5}{4}} |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Ensuite, on utilise une fois de plus l'inégalité de Young pour obtenir

$$|U'_3| \leq \frac{K\Sigma\varepsilon^2}{8} |\Delta(\mathbf{c} - \mathbf{d})|_{L^2}^2 + K_5 |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{4}{3}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{4}{3}} |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2 \quad (\text{II.63})$$

4/ Unicité des solutions fortes pour $d = 3$:

Nous introduisons

$$y(t) = \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |c_i - d_i|_{L^2}^2.$$

Grâce à l'équation (II.58) et aux estimations (II.30), (II.59), (II.60), (II.62) et (II.63), on a

$$y'(t) \leq a(t) |\mathbf{c} - \mathbf{d}|_{L^2}^2,$$

où a est définie par

$$\begin{aligned} a(t) &= K_1 \left(1 + |\mathbf{c}|_{H^1}^{30} |\mathbf{c}|_{H^3}^2 + |\mathbf{d}|_{H^1}^{30} |\mathbf{d}|_{H^3}^2 \right) + K_2 \left(|\nabla \mathbf{d}|_{L^2}^2 |\Delta^2 \mathbf{d}|_{L^2}^2 \right) \\ &\quad + K_3 |\nabla \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{8}{3}} \left(1 + |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{8(r+1)}{3}} + |\Delta \mathbf{d}|_{L^2}^{\frac{8(r+1)}{3}} \right) \\ &\quad + K_4 |\nabla \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{8}{3}} \left(1 + |\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{8(r+1)}{3}} \right) + K_5 \left(|\Delta \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{4}{3}} |\Delta^2 \mathbf{c}|_{L^2}^{\frac{4}{3}} \right). \quad (\text{II.64}) \end{aligned}$$

Grâce à la proposition I.2.3, on déduit que y est une fonction positive et que

$$y'(t) \leq \frac{2}{\Sigma\varepsilon} a(t) y(t).$$

Grâce aux propriétés de régularité (II.1) et (II.37) des solutions \mathbf{c} et \mathbf{d} , la fonction a appartient à $L^1(0, t_f)$. On conclut comme dans la preuve de l'unicité des solutions faibles en utilisant le lemme de Gronwall. \blacksquare

II.3 Stabilité asymptotique des états métastables

En thermodynamique, les états d'équilibre métastables correspondent à des minimums locaux de l'énergie [87]. Si une perturbation est appliquée au système en équilibre métastable, celui-ci va évoluer vers un état d'équilibre stable correspondant à un minimum global de l'énergie.

Pour le problème de Cahn-Hilliard, les états métastables correspondent à des compositions de mélange $\omega = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ tels que le potentiel de Cahn-Hilliard F est convexe au voisinage de ces points. En effet, comme l'ajout d'une fonction affine à F ne change pas les équations de Cahn-Hilliard, on peut vérifier que la fonction constante, égale à ω est un minimum de l'énergie de Cahn-Hilliard $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}$ si F est convexe au voisinage de ω .

On s'intéresse ici à la stabilité asymptotique de ces solutions particulières du problème (I.10). Pour cela, nous avons besoin des hypothèses du théorème II.2.1 sur l'existence et l'unicité des solutions fortes.

Théorème II.3.2 (Stabilité asymptotique des états métastables)

Soit Ω un ouvert de \mathbb{R}^d et $\omega = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) \in \mathcal{S}$ donné. On suppose que les fonctions M_0 et F vérifient les hypothèses du théorème II.2.1. De plus, si pour tout x dans un voisinage \mathcal{W} de ω dans \mathcal{S}

$$(D^2F(x) \cdot \xi, \xi) \geq 0, \text{ pour tout } \xi \in \mathbb{R}^3 \text{ tel que } \sum_{i=1}^3 \xi_i = 0 \quad (\text{II.65})$$

alors la solution stationnaire de (I.10) donnée par $\mathbf{c}^\infty \equiv \omega$ est asymptotiquement stable. Plus précisément, pour tout $\delta > 0$ assez petit, et pour toutes données initiales \mathbf{c}^0 dans $(H^2(\Omega))^3 \cap \mathbb{H}_S^1(\Omega)$ satisfaisant

$$|c_i^0 - m(c_i^0)|_{H^2} \leq \delta \text{ pour } i = 1, 2, 3, \quad (\text{II.66})$$

$$m(c_i^0) = \omega_i \text{ pour } i = 1, 2, 3, \quad (\text{II.67})$$

il existe une unique solution forte globale sur \mathbb{R}^+ du problème (I.10) qui vérifie

$$|\mathbf{c} - \mathbf{c}^\infty|_{L^\infty(0, \infty; H^2)} \leq h(\delta) \text{ pour } i = 1, 2, 3 \quad (\text{II.68})$$

où h est une fonction continue à valeurs positives telle que $h(0) = 0$.

De plus, si δ est assez petit,

$\mathbf{c}(t) - \mathbf{c}^\infty$ tend vers zéro dans H^s pour tout $0 \leq s < 2$ quand t tend vers $+\infty$.

Dans la preuve, nous allons, tout d'abord, étudier un problème approché telle que la solution forte obtenue vérifie (II.68). Grâce à cette propriété, on montre que cette solution est, en fait, la solution forte du problème initial (I.10). De plus, en dimension 3, on prouve que cette solution est globale contrairement au cas générique. Enfin, nous concluons sur le comportement asymptotique des états métastables.

Preuve.

Etape 1 : Problème approché

Soit $\alpha > 0$ tel que

$$\mathcal{S}_\alpha = [\omega_1 - \alpha; \omega_1 + \alpha] \times [\omega_2 - \alpha; \omega_2 + \alpha] \times [\omega_3 - \alpha; \omega_3 + \alpha] \cap \mathcal{S} \subset \mathcal{W}. \quad (\text{II.69})$$

On peut construire une fonction F^ω de classe \mathcal{C}^3 telle que

$$\begin{aligned} F^\omega(\omega) &= 0, \quad DF^\omega(\omega) = 0, \\ \begin{cases} D^2F^\omega(x) = D^2F(x) \text{ si } x \in \mathcal{S}_\alpha \\ (D^2F^\omega(x) \cdot \xi, \xi) \geq 0, \text{ pour tout } \xi \in \mathbb{R}^3 \text{ tel que } \sum_{i=1}^3 \xi_i = 0, \text{ si } x \notin \mathcal{S}_\alpha \end{cases} \\ D^3F^\omega &\text{ est bornée sur } \mathbb{R}^3. \end{aligned}$$

La fonction F^ω , ainsi construite, vérifie les hypothèses (I.18), (I.19), (I.20), (I.21) et (II.36). De la même manière, on définit une fonction M_0^ω de classe \mathcal{C}^1 satisfaisant les hypothèses (I.22), (I.23) vérifiées par M_0 et telle que

$$M_0^\omega(x) = M_0(x) \quad \forall x \in \mathcal{S}_\alpha.$$

On peut alors appliquer le théorème II.2.1 avec $F = F^\omega$ et $M_0 = M_0^\omega$ et obtenir l'existence d'une solution forte \mathbf{c}^ω au problème modifié.

Etape 2 : \mathbf{c}^ω est solution forte du problème initial (I.10) pour $d = 2$

Comme $\sum_{i=1}^3 (\omega_i - \mathbf{x}_i) = 0$ pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ alors la convexité de F^ω selon \mathcal{S} entraîne

$$0 = F^\omega(\omega) \geq F^\omega(\mathbf{x}) + DF^\omega(\mathbf{x}) \cdot (\omega - \mathbf{x}), \text{ pour tout } \mathbf{x} \in \mathcal{S}. \quad (\text{II.70})$$

Prenons $c_i^\omega - m(c_i^\omega)$ comme fonction test dans les équations (II.4) pour $i = 1, 2, 3$

$$(\mu_i^\omega, c_i^\omega - m(c_i^\omega)) = \int_{\Omega} \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i |\nabla c_i^\omega|^2 dx + \int_{\Omega} \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F^\omega(\mathbf{c}^\omega) - \partial_j F^\omega(\mathbf{c}^\omega)) \right) (c_i^\omega - m(c_i^\omega)) dx.$$

D'autre part, en remarquant que $m(c_i^\omega - m(c_i^\omega)) = 0$ pour $i = 1, 2, 3$, il vient

$$\begin{aligned} (\mu_i^\omega, c_i^\omega - m(c_i^\omega)) &= (\mu_i^\omega - m(\mu_i^\omega), c_i^\omega - m(c_i^\omega)) \\ &\leq |\mu_i^\omega - m(\mu_i^\omega)|_{L^2} |c_i^\omega - m(c_i^\omega)|_{L^2} \\ &\leq K |\mu_i^\omega - m(\mu_i^\omega)|_{H^1} |c_i^\omega - m(c_i^\omega)|_{H^1} \\ &\leq K |\nabla \mu_i^\omega|_{L^2} |\nabla c_i^\omega|_{L^2}. \end{aligned} \quad (\text{II.71})$$

En sommant ensuite les équations sur i et en remarquant que $\sum_{i=1}^3 (c_i^\omega - m(c_i^\omega)) = 0$, on obtient

$$\sum_{i=1}^3 (\mu_i^\omega, c_i^\omega - m(c_i^\omega)) = \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i |\nabla c_i^\omega|^2 dx + \sum_{i=1}^3 \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} \partial_i F^\omega(\mathbf{c}^\omega) \cdot (c_i^\omega - m(c_i^\omega)) dx. \quad (\text{II.72})$$

Comme $m(c_i^\omega) = \omega_i$, les équations (II.70), (II.71) et (II.72) entraînent

$$\int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i |\nabla c_i^\omega|^2 dx + \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} F^\omega(\mathbf{c}^\omega) dx \leq K \sum_{i=1}^3 |\nabla \mu_i^\omega|_{L^2} |\nabla c_i^\omega|_{L^2}.$$

On utilise alors l'inégalité de Young et la proposition I.2.3, pour obtenir

$$\int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3\varepsilon \Sigma_i}{8} |\nabla c_i^\omega|^2 dx + \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} F^\omega(\mathbf{c}^\omega) dx \leq \sum_{i=1}^3 \frac{K}{\varepsilon \Sigma_i} |\nabla \mu_i^\omega|_{L^2}^2. \quad (\text{II.73})$$

D'après les équations (II.7) et (II.73), il existe une constante γ qui dépend de ε , $\underline{\Sigma}$, M_0 , Σ_i telle que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3\varepsilon \Sigma_i}{8} |\nabla c_i^\omega|^2 dx + \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} F^\omega(\mathbf{c}^\omega) dx \right) \\ + \gamma \left(\int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3\varepsilon \Sigma_i}{8} |\nabla c_i^\omega|^2 dx + \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} F^\omega(\mathbf{c}^\omega) dx \right) \leq 0. \end{aligned}$$

Grâce à l'inégalité précédente et la proposition I.2.3, en posant

$$y_\omega(t) = \int_{\Omega} \left[\sum_{i=1}^3 \frac{3\varepsilon \Sigma_i}{8} |\nabla c_i^\omega|^2 + \frac{12}{\varepsilon} F^\omega(\mathbf{c}^\omega) \right] dx,$$

il vient

$$y'_\omega(t) + \gamma y_\omega(t) \leq 0, \quad \forall t \in [0, t_f[.$$

Ainsi, on obtient

$$y_\omega(t) \leq e^{-\gamma t} y_\omega(0), \quad \forall t \in [0, t_f[.$$

En utilisant l'hypothèse (II.67) et la propriété de convexité (II.70) de F^ω , le terme $y_\omega(0)$ est contrôlé par

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[\sum_{i=1}^3 \frac{3\varepsilon \Sigma_i}{8} |\nabla c_i^\omega(0)|^2 + \frac{12}{\varepsilon} F^\omega(\mathbf{c}^\omega(0)) \right] dx \\ & \leq \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3\varepsilon \Sigma_i}{8} |\nabla c_i^\omega(0)|^2 dx + \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} DF^\omega(\mathbf{c}^0) \cdot (\mathbf{c}^0 - m(\mathbf{c}^0)) dx. \end{aligned} \quad (\text{II.74})$$

L'hypothèse (I.19) sur les dérivées premières de F^ω entraîne

$$\begin{aligned} y_\omega(0) & \leq \sum_{i=1}^3 \frac{3\varepsilon \Sigma_i}{8} |\nabla c_i^0|_{L^2}^2 + \frac{K}{\varepsilon} |\mathbf{c}^0 - m(\mathbf{c}^0)|_{L^2} \left(1 + |\mathbf{c}^0|_{L^2}^{p-1} \right) \\ & \leq \sum_{i=1}^3 \frac{3\varepsilon \Sigma_i}{8} |\nabla c_i^0|_{L^2}^2 + \frac{K}{\varepsilon} |\mathbf{c}^0 - m(\mathbf{c}^0)|_{L^2} \left(1 + |\mathbf{c}^0|_{H^2}^{p-1} \right). \end{aligned}$$

On redéfinit l'expression de k_1 donnée dans l'équation (II.9) par

$$k_1 = \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |\nabla c_i^0|_{L^2}^2 + \frac{K}{\varepsilon} |\mathbf{c}^0 - m(\mathbf{c}^0)|_{L^2} \left(1 + |\mathbf{c}^0|_{H^2}^{p-1} \right). \quad (\text{II.75})$$

On aura besoin, dans la suite, de cette nouvelle définition de k_1 . Grâce aux propriétés de régularité (II.1) et (II.37), k_1 tend vers zéro quand $|\mathbf{c}^0 - \omega|_{H^1}$ tend vers zéro et on a

$$y_\omega(t) \leq e^{-\gamma t} y_\omega(0) \leq k_1 e^{-\gamma t}.$$

On utilise ensuite les estimations obtenues pour les solutions fortes. Ainsi, grâce à (II.52) et (II.53), on a

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |\Delta c_i^\omega|_{L^2}^2 \leq (\max(k_5, k_2^2) + k_3) e^{k_4} = k_6, \quad (\text{II.76})$$

où les coefficients k_2, k_3, k_4 , définis par (II.20) et (II.51), ne dépendent que de k_1 et le coefficient k_5 défini par (II.53) tend vers zéro quand $|c_i^0 - \omega_i|_{H^2}$ tend vers zéro.

Par conséquent, en utilisant (II.76) et les propriétés de régularité du Laplacien, il existe une fonction $h : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ continue, vérifiant $h(0) = 0$, telle que pour tout $\delta > 0$, si

$$|\mathbf{c}^0 - m(\mathbf{c}^0)|_{H^2} = |\mathbf{c}^0 - \omega|_{H^2} \leq \delta, \quad (\text{II.77})$$

on a

$$|\mathbf{c}^\omega(t) - \omega|_{H^2} \leq h(\delta), \quad \forall t \geq 0. \quad (\text{II.78})$$

D'après la régularité des solutions fortes (II.37), la fonction \mathbf{c}^ω appartient à $\mathcal{C}^0([0, +\infty[; (H^2(\Omega))^3)$, elle est donc continue en temps et en espace. Ainsi, si δ est suffisamment petit dans (II.77), on a

$$|\mathbf{c}^\omega(t, \mathbf{x}) - \omega| \leq \alpha, \quad \forall (t, \mathbf{x}) \in [0, +\infty[\times \Omega. \quad (\text{II.79})$$

Finalement, d'après la définition de la fonction M_0^ω et en utilisant (II.79), il vient

$$M_0^\omega(\mathbf{c}^\omega(t, \mathbf{x})) = M_0(\mathbf{c}^\omega(t, \mathbf{x})), \quad \forall (t, \mathbf{x}) \in [0, +\infty[\times \Omega.$$

D'après la construction de F^ω , on a en particulier

$$D^2 F^\omega(\mathbf{c}^\omega) = D^2 F(\mathbf{c}^\omega) \quad \text{si } \mathbf{c}^\omega \in \mathcal{S}_\alpha.$$

Ainsi, grâce à (II.79), on obtient

$$F^\omega(\mathbf{c}^\omega) = F(\mathbf{c}^\omega) - F(\omega) - DF(\omega) \cdot (\mathbf{c}^\omega - \omega),$$

puisque $\sum_{i=1}^3 (c_i^\omega - \omega_i) = 0$. Dans les équations (I.10), F n'intervient que dans les termes $\nabla \mu_i$. Par conséquent, l'ajout d'une fonction affine à F ne change pas la solution. On en déduit que \mathbf{c}^ω est solution forte du problème initial (I.10) avec le potentiel F et la mobilité M_0 .

Etape 3 : \mathbf{c}^ω est solution forte globale du problème initial pour $d = 3$

Dans le cas de la dimension 3, l'estimation d'énergie est la même que dans l'étape 2. Ainsi, k_1 est défini par (II.75) et tend vers zéro quand $|\mathbf{c}^0 - \omega|_{\mathbb{H}^1}$ tend vers zéro.

Pour prouver l'existence globale de la solution forte, on utilise l'estimation (II.57) obtenue pour $d = 3$ qui peut s'écrire grâce aux propriétés du Laplacien

$$y'_\omega(t) + \tau y_\omega(t) \leq a^\omega(t) + k y_\omega^{10}(t) y_\omega(t)$$

où $y_\omega = \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} |\Delta c_i^\omega|_{L^2}^2$ et τ est une constante qui dépend de ε , Σ_i et $\underline{\Sigma}$.

Choisissons $\delta > 0$ suffisamment petit pour que si $|\mathbf{c}^0 - \omega|_{\mathbb{H}^2} \leq \delta$ alors on a

$$k y_\omega^{10}(0) \leq \frac{\tau}{2}.$$

Comme les solutions fortes sont continues en temps, il existe un temps $t_1 > 0$ tel que pour tout $0 \leq t < t_1$, on a

$$k y_\omega^{10}(t) \leq \tau. \quad (\text{II.80})$$

Soit t_m le temps maximal pour lequel cette propriété reste vraie. Sur l'intervalle $[0, t_m[$, il vient

$$y'_\omega(t) + \tau y_\omega(t) \leq a^\omega(t) + \tau y_\omega(t)$$

c'est-à-dire

$$y'_\omega(t) \leq a^\omega(t).$$

D'après l'estimation (II.10), la fonction

$$a^\omega(t) = K_1 |\nabla \mathbf{c}^\omega|_{L^2}^6 \left(1 + |\nabla \mathbf{c}^\omega|_{L^2}^\beta \right)$$

vérifie

$$\int_t^{t+1} a^\omega(s) ds \leq k_7,$$

où k_7 dépend de k_1 . Ainsi, on obtient en utilisant le lemme de Gronwall uniforme

$$y_\omega(t) \leq k_7 + y(0) = k_7 + k_5 = k_9, \quad \forall 0 \leq t < t_f.$$

D'après les propriétés de régularité des solutions faibles et fortes, k_9 tend vers zéro lorsque $\|\mathbf{c}^0 - \boldsymbol{\omega}\|_{H^2}$ tend vers zéro. Il existe δ assez petit tel que si

$$\|\mathbf{c}^0 - \boldsymbol{\omega}\|_{H^2} < \delta$$

alors on a

$$k_9 < \left(\frac{\tau}{2k}\right)^{\frac{1}{10}}.$$

Par conséquent, on obtient

$$ky_\omega^{10}(t) \leq \frac{\tau}{2}, \quad \forall 0 < t \leq t_m.$$

Finalement, grâce à la continuité en temps de y et à la maximalité de t_m , on conclut que $t_m = +\infty$.

Ainsi, il existe une unique solution forte globale \mathbf{c}^ω au problème modifié vérifiant, de plus,

$$y_\omega(t) \leq k_9, \quad \forall t \geq 0$$

ce qui entraîne

$$\|\mathbf{c}^\omega - \mathbf{c}^0\|_{L^\infty(0,\infty;H^2)} \leq h(\delta). \quad (\text{II.81})$$

On conclut ensuite comme dans l'étape précédente.

Etape 4 : Comportement asymptotique

Afin de simplifier les notations, \mathbf{c}^ω est notée \mathbf{c} dans la suite de la preuve.

D'après les équations (I.10), on peut écrire la formulation variationnelle suivante

$$\begin{aligned} \forall \varphi \in H_n^2, \quad \frac{d}{dt}(c_i - \omega_i, \varphi) &= - \int_{\Omega} \frac{M_0(\mathbf{c})}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \cdot \nabla \varphi \, dx \\ &= - \frac{3}{4} \varepsilon \int_{\Omega} \Delta c_i \nabla M_0(\mathbf{c}) \cdot \nabla \varphi \, dx - \frac{3}{4} \varepsilon \int_{\Omega} M_0(\mathbf{c}) \Delta c_i \Delta \varphi \, dx \\ &\quad - \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon \Sigma_i} \int_{\Omega} M_0(\mathbf{c}) \sum_{j \neq i} \frac{1}{\Sigma_j} \left(\nabla (\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c})) \cdot \nabla \varphi \right) dx. \end{aligned}$$

Prenons $\varphi = \varepsilon \Sigma_i (c_i - \omega_i)$ dans les équations. En sommant les équations sur i et en utilisant le fait que $\sum_{i=1}^3 (c_i - \omega_i) = 0$, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} \frac{d}{dt} |c_i - \omega_i|_{L^2}^2 + \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i M_1 |\Delta c_i|_{L^2}^2 + \sum_{i=1}^3 12 M_1 \int_{\Omega} D^2 F(\mathbf{c}) \partial_i \mathbf{c} \cdot \partial_i \mathbf{c} \, dx \\ \leq \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i \int_{\Omega} |DM_0(\mathbf{c})| |\Delta c_i| |\nabla \mathbf{c}|^2 \, dx. \quad (\text{II.82}) \end{aligned}$$

Comme $D^2 F$ est positive sur \mathcal{S}_α , on obtient

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} \frac{d}{dt} |c_i - \omega_i|_{L^2}^2 + \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i M_1 |\Delta c_i|_{L^2}^2 \leq \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i |DM_0(\mathbf{c})|_{\infty} |\Delta c_i|_{L^2} |\nabla \mathbf{c}|_{L^4}^2.$$

On utilise ensuite l'injection de $H^1 \subset L^4$ en dimension deux et trois et les propriétés de régularité du Laplacien pour estimer le terme $|\nabla \mathbf{c}|_{L^4}$

$$|\nabla \mathbf{c}|_{L^4} \leq K |\nabla \mathbf{c}|_{H^1} \leq K \|\mathbf{c} - m(\mathbf{c})\|_{H^2} \leq K \|\mathbf{c} - m(\mathbf{c})\|_{H^2}^{\frac{1}{2}} \|\Delta \mathbf{c}\|_{L^2}^{\frac{1}{2}}.$$

Finalement, en utilisant l'hypothèse (II.67) sur $m(\mathbf{c})$ et les équations (II.66), (II.78) et (II.81), il vient

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} \frac{d}{dt} |c_i - \omega_i|_{L^2}^2 + \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i M_1 |\Delta c_i|_{L^2}^2 &\leq \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i M_3 |\Delta c_i|_{L^2}^2 |\mathbf{c} - m(\mathbf{c})|_{H^2} \\ &\leq \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i M_3 |\Delta c_i|_{L^2}^2 |\mathbf{c} - \boldsymbol{\omega}|_{H^2} \\ &\leq \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i M_3 (h(\delta) + \delta) |\Delta c_i|_{L^2}^2. \end{aligned}$$

Si on choisit δ assez petit pour que $M_3(h(\delta) + \delta) \leq \frac{M_1}{2}$, on a

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\varepsilon \Sigma_i}{2} \frac{d}{dt} |c_i - \omega_i|_{L^2}^2 + \sum_{i=1}^3 \frac{3}{4} \varepsilon^2 \Sigma_i \frac{M_1}{2} |\Delta c_i|_{L^2}^2 \leq 0.$$

En utilisant une fois de plus les propriétés de régularité de l'opérateur Laplacien, on en déduit qu'il existe une constante $\beta > 0$ telle que

$$|c_i(t) - \omega_i|_{L^2}^2 \leq K e^{-\beta t}.$$

Par conséquent, $\mathbf{c}(t) - \boldsymbol{\omega}$ tend vers zéro dans $L^2(\Omega)$ quand t tend vers l'infini. De plus, comme $\mathbf{c} - \boldsymbol{\omega}$ appartient à $L^\infty(\mathbb{R}^+; H^2(\Omega))$, on en déduit par interpolation que $\mathbf{c}(t) - \boldsymbol{\omega}$ tend vers zéro exponentiellement dans $H^s(\Omega)$, pour tout $0 \leq s < 2$, quand t tend vers l'infini. ■

Chapitre III

Schémas numériques et propriétés du modèle discret

Ce chapitre est dédié aux schémas numériques utilisés dans les applications présentées dans le chapitre IV, pour la résolution du problème de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes anisotherme. On s'attache en particulier à vérifier que le modèle discret satisfait des propriétés analogues à celles du problème continu.

Rappelons les équations du modèle :

$$\text{équations de Cahn-Hilliard} \quad \frac{\partial c_i}{\partial t} + u \cdot \nabla c_i = \nabla \cdot \left(\frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right), \text{ pour } i=1,2,3 \quad (\text{III.1})$$

$$\mu_i = f_i^F(\mathbf{c}) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i, \text{ pour } i=1,2,3 \quad (\text{III.2})$$

$$\text{équations de Navier-Stokes} \quad \nabla \cdot u = 0, \quad (\text{III.3})$$

$$\varrho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = \nabla \cdot (2\eta D(u)) - \nabla p + \sum_{i=1}^3 \mu_i \nabla c_i + \varrho g, \quad (\text{III.4})$$

$$\text{équation du bilan d'énergie} \quad \varrho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T). \quad (\text{III.5})$$

où on note

$$f_i^F(\mathbf{c}) = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c})) \right), \quad (\text{III.6})$$

et $D(u) = \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^t)$. On rappelle que les paramètres physiques (ϱ , η , c_p , λ) dépendent des paramètres d'ordre, ainsi que la mobilité. De plus, le modèle de Cahn-Hilliard a été construit afin d'assurer que la somme des paramètres d'ordre vaut 1 à tout instant et en tout point. Par conséquent, les équations (III.1)-(III.2) vérifiées par exemple par (c_3, μ_3) , peuvent être remplacées par

$$c_3 = 1 - c_1 - c_2, \quad \mu_3 = - \left(\frac{\Sigma_3}{\Sigma_1} \mu_1 + \frac{\Sigma_3}{\Sigma_2} \mu_2 \right). \quad (\text{III.7})$$

Numériquement, seules les équations de Cahn-Hilliard vérifiées par (c_1, μ_1, c_2, μ_2) sont résolues.

Soient $\Gamma = \Gamma_D^c \cup \Gamma_N^c$, $\Gamma = \Gamma_D^u \cup \Gamma_t^u \cup \Gamma_\tau^u$ et $\Gamma = \Gamma_D^T \cup \Gamma_N^T$ des partitions régulières de Γ . Les

conditions aux limites associées aux équations précédentes sont

$$c_i = c_{iD} \text{ et } M_0 \nabla \mu_i \cdot n = 0, \quad \text{sur } \Gamma_D^c \quad (\text{III.8})$$

$$\nabla c_i \cdot n = 0 \text{ et } M_0 \nabla \mu_i \cdot n = 0, \quad \text{sur } \Gamma_N^c \quad (\text{III.9})$$

$$u = u_D, \quad \text{sur } \Gamma_D^u \quad (\text{III.10})$$

$$u \cdot n = 0 \text{ et } (2\eta D(u)n - pn) \cdot t = 0, \quad \text{sur } \Gamma_t^u \quad (\text{III.11})$$

$$2\eta D(u)n - pn = 0, \quad \text{sur } \Gamma_\tau^u \quad (\text{III.12})$$

$$T = T_D, \quad \text{sur } \Gamma_D^T \quad (\text{III.13})$$

$$\nabla T \cdot n = 0, \quad \text{sur } \Gamma_N^T \quad (\text{III.14})$$

où les grandeurs (c_{iD}, u_D, T_D) sont données.

Les conditions de Dirichlet pour les paramètres d'ordre seront utilisées pour assurer la création d'un train de bulles dans le paragraphe IV.4.2 et n'ont pas été traitées dans les études des chapitres I et II.

Enfin, à $t = 0$, on a

$$\begin{aligned} u &= u^0, \\ c_i &= c_i^0 \text{ tels que } \sum_{i=1}^3 c_i^0 = 1, \\ T &= T^0, \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

où $(u^0, c_1^0, c_2^0, c_3^0, T^0)$ sont donnés.

Nous prenons des discrétisations spatiales et temporelles telles que le problème discret vérifie des propriétés similaires à celles du problème continu que nous rappelons dans la proposition suivante.

Proposition III.0.1

Si $(\mathbf{c}, \boldsymbol{\mu}, u, p)$ vérifient (III.1)-(III.4) ainsi que les conditions au bord (III.8)-(III.12) alors

- 1. si $\text{mes}(\Gamma_\tau^u) = 0$ et $u_D = 0$ alors le volume de chaque phase est conservé au cours du temps*

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} c_i dx = 0 \text{ pour } i = 1, 2, 3,$$

- 2. si $\mathbf{c}^0 \in \mathcal{S} = \{(c_1, c_2, c_3) \in \mathbb{R}^3, c_1 + c_2 + c_3 = 1\}$ alors $\mathbf{c}(t) \in \mathcal{S}$ pour tout $t \geq 0$,*

- 3. si $u \equiv 0$, l'énergie libre $\mathcal{F}_{\boldsymbol{\Sigma}, \varepsilon}^{\text{triph}}$ vérifie*

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F}_{\boldsymbol{\Sigma}, \varepsilon}^{\text{triph}} = - \sum_{i=1}^3 \frac{M_0}{\Sigma_i} \int_{\Omega} |\nabla \mu_i|^2 dx.$$

Pour vérifier la deuxième propriété, nous montrerons que le problème discret écrit sous la forme d'un système de Cahn-Hilliard vérifié par (c_1, μ_1, c_2, μ_2) et d'une équation similaire à (III.7) est équivalent au problème de Cahn-Hilliard vérifié par $(c_1, \mu_1, c_2, \mu_2, c_3, \mu_3)$. Comme les systèmes sont équivalents, nous utiliserons l'un ou l'autre pour montrer les propriétés du schéma discret.

Nous utilisons une semi-discrétisation en temps pour découpler les problèmes de Cahn-Hilliard et de Navier-Stokes dans un pas de temps. Nous nous concentrons plus particulièrement sur la façon de discrétiser en temps les termes non-linéaires dans les équations (III.2). Ceci intervient de façon cruciale dans l'établissement de l'estimation de l'énergie discrète.

Pour la discrétisation spatiale, nous utilisons une méthode des éléments finis. Des contraintes apparaissent sur le choix des éléments d'approximation des inconnues pour que le modèle discret

vérifie des propriétés analogues aux deux premières de la proposition III.0.1. En particulier, nous prenons le même élément pour approcher les paramètres d'ordre et la pression.

La conservation du volume des phases est liée aussi à la contrainte d'incompressibilité. Nous proposons différentes méthodes de résolution des équations de Navier-Stokes : la méthode du Lagrangien augmenté [45], la méthode de projection incrémentale [54] et une méthode de pénalité-projection [64]. Nous donnons un exemple pour montrer l'impact des différentes méthodes sur la conservation du volume des phases.

Pour illustrer ces résultats, nous prenons comme exemple l'étalement d'une lentille entre deux phases stratifiées et la montée d'une bulle dans un liquide. Des études plus détaillées sur ces exemples sont données dans le chapitre IV. De plus, nous regardons l'influence de quelques paramètres comme la mobilité ou l'épaisseur d'interface.

L'implémentation numérique a été faite à l'aide de la plate-forme PELICANS¹, développée à l'IRSN, basée sur une conception orientée objet [88].

Tous les paramètres physiques et numériques des résultats présentés dans ce chapitre sont rassemblés dans l'annexe F.

Dans le premier paragraphe, on s'intéresse à la discrétisation en temps et en espace des équations de Cahn-Hilliard seules. Nous proposons différentes discrétisations en temps pour les termes non-linéaires afin d'avoir l'estimation de l'énergie discrète et d'en déduire l'existence et l'unicité de la solution approchée dans certains cas. Le deuxième paragraphe est dédié à la discrétisation du problème couplé de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes anisotherme. Dans le troisième paragraphe, nous détaillons les méthodes de résolution utilisées dans la suite. Enfin, dans le dernier paragraphe, nous étudions l'influence de quelques paramètres : la régularisation des paramètres physiques, la mobilité, le pas de maillage et l'épaisseur d'interface.

III.1 Discrétisation du problème de Cahn-Hilliard et estimation d'énergie

Nous présentons tout d'abord les discrétisations temporelles et spatiales du problème de Cahn-Hilliard. On étudie ensuite l'estimation de l'énergie pour les potentiels de Cahn-Hilliard $F = F_0$ et $F = F_{\Lambda,0}$. Grâce à un théorème reposant sur la théorie du degré topologique en dimension finie, cette estimation permet de montrer l'existence de la solution discrète.

La discrétisation du modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes couplé sera donnée dans le paragraphe III.2.

III.1.1 Discrétisation en temps

L'intervalle de temps $[0; t_f]$ est discrétisé régulièrement avec un pas de temps fixé Δt . On note $c^n = c(t^n) = c(t + n\Delta t)$.

La dérivée temporelle dans l'équation (III.1) est approchée avec un schéma d'Euler implicite d'ordre 1. Dans l'équation (III.1), la mobilité peut dépendre des paramètres d'ordre. Dans ce cas, elle peut être discrétisée de manière explicite $M_0^n = M_0(c^n)$ ou implicite $M_0^{n+1} = M_0(c^{n+1})$. La première discrétisation a été le plus souvent choisie car elle est moins coûteuse en temps calcul que la seconde. En effet, nous résolvons le problème de Cahn-Hilliard par un algorithme de Newton (§III.3.1) : en explicitant la mobilité, les termes contenant celle-ci ne sont pas assemblés à chaque itération de l'algorithme. Par contre, la discrétisation implicite de la mobilité a l'avantage d'être plus précise et sera utilisée s'il y a de forts changements topologiques des interfaces en un court instant. Pour les termes non-linéaires dans (III.2), différentes discrétisations sont étudiées dans les

¹Plateforme Evolutive de Librairies de Composants pour l'Analyse Numérique et Statistique

paragraphes III.1.3 et III.1.4 où on établit l'estimation de l'énergie pour différents potentiels de Cahn-Hilliard. Les discrétisations envisagées sont soit implicites, soit semi-implicites.

Les équations discrétisées en temps sont

$$\begin{aligned} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} + u^n \cdot \nabla c_i^{n+1} &= \nabla \cdot \left(\frac{M_0^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_i^{n+1} \right), \text{ pour } i = \{1, 2\}, \\ \mu_i^{n+1} &= D_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i^{n+1}, \text{ pour } i = \{1, 2\} \end{aligned} \quad (\text{III.16})$$

où $\ell = n$ ou $n+1$ et $D_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (d_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) - d_j(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n)) \right)$. Les fonctions d_i

vérifient $d_i(x, x) = \frac{\partial F}{\partial c_i}(x)$.

On pose ensuite

$$c_3^{n+1} = 1 - c_1^{n+1} - c_2^{n+1}, \quad \mu_3^{n+1} = -\Sigma_3 \left(\frac{1}{\Sigma_1} \mu_1^{n+1} + \frac{1}{\Sigma_2} \mu_2^{n+1} \right). \quad (\text{III.17})$$

Les conditions au bord associées sont

$$c_i^{n+1} = c_{iD} \text{ et } M_0 \nabla \mu_i^{n+1} \cdot n = 0, \text{ sur } \Gamma_D^c \quad (\text{III.18})$$

$$\nabla c_i^{n+1} \cdot n = 0 \text{ et } M_0 \nabla \mu_i^{n+1} \cdot n = 0, \text{ sur } \Gamma_N^c \quad (\text{III.19})$$

Les termes non-linéaires D_i dans (III.16) peuvent dépendre seulement de \mathbf{c}^{n+1} si on considère par exemple une discrétisation implicite définie par

$$D_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) = f_i^F(\mathbf{c}^{n+1}) = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}^{n+1}) - \partial_j F(\mathbf{c}^{n+1})) \right).$$

Par contre, cette discrétisation ne permet pas d'établir l'estimation d'énergie (§III.1.3) mais sera utilisée dans la plupart des exemples numériques du chapitre.

Cette discrétisation en temps permet de vérifier, comme pour le problème continu (proposition III.0.1), que le volume de chaque phase est conservé à chaque pas de temps. De plus, on montre aisément que le problème (III.16)-(III.17) est équivalent au problème suivant pour $i = 1, 2, 3$

$$\begin{aligned} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} + u^n \cdot \nabla c_i^{n+1} &= \nabla \cdot \left(\frac{M_0^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_i^{n+1} \right), \\ \mu_i^{n+1} &= D_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i^{n+1}, \end{aligned}$$

où $D_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (d_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) - d_j(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n)) \right)$.

III.1.2 Discrétisation en espace

D'après les conditions au bord (III.8)-(III.9), on introduit les espaces suivants

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_D^{c_i} &= \{ \nu^{c_i} \in H^1(\Omega) \mid \nu^{c_i} = c_{iD} \text{ sur } \Gamma_D^c \} \\ \mathcal{V}^c &= \{ \nu^c \in H^1(\Omega) \mid \nu^c = 0 \text{ sur } \Gamma_D^c \} \\ \mathcal{V}^\mu &= \{ \nu^\mu \in H^1(\Omega) \}. \end{aligned}$$

La formulation variationnelle du problème (III.16) s'écrit :

Trouver $(c_1^{n+1}, c_2^{n+1}, \mu_1^{n+1}, \mu_2^{n+1}) \in \mathcal{V}_D^{c_1} \times \mathcal{V}_D^{c_2} \times (\mathcal{V}^\mu)^2$ tel que $\forall \nu^\mu \in \mathcal{V}^\mu, \forall \nu^c \in \mathcal{V}^c$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_1^{n+1} - c_1^n}{\Delta t} \nu^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_0^\ell}{\Sigma_1} \nabla \mu_1^{n+1} \cdot \nabla \nu^\mu dx, \\ \int_{\Omega} \mu_1^{n+1} \nu^c dx &= \int_{\Omega} D_1(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) \nu^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_1 \varepsilon \nabla c_1^{n+1} \cdot \nabla \nu^c dx, \\ \int_{\Omega} \frac{c_2^{n+1} - c_2^n}{\Delta t} \nu^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_0^\ell}{\Sigma_2} \nabla \mu_2^{n+1} \cdot \nabla \nu^\mu dx, \\ \int_{\Omega} \mu_2^{n+1} \nu^c dx &= \int_{\Omega} D_2(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) \nu^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_2 \varepsilon \nabla c_2^{n+1} \cdot \nabla \nu^c dx, \end{aligned} \quad (\text{III.20})$$

Comme les paramètres d'ordre vérifient des conditions de Dirichlet non homogènes sur le bord Γ_D^c , on utilise un relèvement. Les nouvelles inconnues sont définies par $\bar{c}_i^{n+1} = c_i^{n+1} - c_{iD}$ avec $c_{iD} \in \mathcal{V}_D^{c_i}$.

On introduit \mathcal{V}_h^c et \mathcal{V}_h^μ des espaces éléments finis approchant respectivement \mathcal{V}^c et \mathcal{V}^μ , obtenus à partir d'une triangulation régulière de Ω , notée \mathcal{T}^h . En utilisant le relèvement, l'approximation de Galerkin du problème variationnel (III.20) précédent s'écrit alors :

Trouver $(\bar{c}_{1h}^{n+1}, \bar{c}_{2h}^{n+1}, \mu_{1h}^{n+1}, \mu_{2h}^{n+1}) \in (\mathcal{V}_h^c)^2 \times (\mathcal{V}_h^\mu)^2$ tel que $\forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu, \forall \nu_h^c \in \mathcal{V}_h^c$,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\bar{c}_{1h}^{n+1} - \bar{c}_{1h}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_1} \nabla \mu_{1h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \\ \int_{\Omega} \mu_{1h}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} D_1(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_1 \varepsilon \nabla \bar{c}_{1h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_1 \varepsilon \nabla c_{1Dh} \cdot \nabla \nu_h^c dx, \\ \int_{\Omega} \frac{\bar{c}_{2h}^{n+1} - \bar{c}_{2h}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_2} \nabla \mu_{2h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \\ \int_{\Omega} \mu_{2h}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} D_2(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_2 \varepsilon \nabla \bar{c}_{2h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_2 \varepsilon \nabla c_{2Dh} \cdot \nabla \nu_h^c dx. \end{aligned} \quad (\text{III.21})$$

En faisant intervenir les bases éléments finis

$$\mathcal{V}_h^c = \text{vect}\{\nu_I^c \mid 1 \leq I \leq N^c\} \quad \text{et} \quad \mathcal{V}_h^\mu = \text{vect}\{\nu_I^\mu \mid 1 \leq I \leq N^\mu\},$$

le problème (III.21) peut alors être reformulé sous la forme du problème non linéaire suivant :

Trouver $[\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}] \in (\mathbb{R}^{N^c})^2 \times (\mathbb{R}^{N^\mu})^2$ tel que

$$\begin{cases} \mathcal{R}^{\mu_1}(\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}) = 0, \\ \mathcal{R}^{c_1}(\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}) = 0, \\ \mathcal{R}^{\mu_2}(\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}) = 0, \\ \mathcal{R}^{c_2}(\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}) = 0, \end{cases}$$

où les inconnues \mathbf{C}_i^{n+1} et \mathbf{M}_i^{n+1} sont les vecteurs respectifs des composantes de c_{ih}^{n+1} et μ_{ih}^{n+1} dans les bases de \mathcal{V}_h^c et \mathcal{V}_h^μ . Les fonctions non linéaires \mathcal{R}^{c_i} et \mathcal{R}^{μ_i} à valeurs respectivement dans \mathbb{R}^{N^c} et \mathbb{R}^{N^μ} sont données comme suit

$\forall 1 \leq I \leq N^\mu$,

$$\mathcal{R}_I^{\mu_i} = \int_{\Omega} \frac{\bar{c}_{ih}^{n+1} - \bar{c}_{ih}^n}{\Delta t} \nu_I^\mu dx + \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_I^\mu dx,$$

$\forall 1 \leq I \leq N^c$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_I^c &= \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_I^c dx - \int_{\Omega} D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_I^c dx \\ &\quad - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla \overline{c_{ih}^{n+1}} \cdot \nabla \nu_I^c dx - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{iDh} \cdot \nabla \nu_I^c dx. \end{aligned}$$

Remarque III.1.2

Dans la suite, nous écrirons les équations en utilisant c_{ih}^n plutôt que $\overline{c_{ih}^n}$ en remarquant en particulier que $c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n \in \mathcal{V}_h^c$.

On pose

$$c_{3h}^{n+1} = 1 - c_{1h}^{n+1} - c_{2h}^{n+1} \quad \mu_{3h}^{n+1} = - \left(\frac{\Sigma_3}{\Sigma_1} \mu_{1h}^{n+1} + \frac{\Sigma_3}{\Sigma_2} \mu_{2h}^{n+1} \right). \quad (\text{III.22})$$

On montre que le problème (III.21)-(III.22) est équivalent au problème suivant pour $i = 1, 2, 3$
 $\forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu, \forall \nu_h^c \in \mathcal{V}_h^c$,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \\ \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx. \end{aligned} \quad (\text{III.23})$$

On utilisera les deux formulations dans la suite pour montrer les propriétés du schéma.

Enfin comme $1 \in \mathcal{V}_h^\mu$, il est clair que pour $i = 1, 2, 3$

$$\int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} dx = 0.$$

III.1.3 Estimation d'énergie pour $F = F_0$

On s'intéresse maintenant à l'estimation de l'énergie pour le problème de Cahn-Hilliard discret avec $F = F_0$.

Pour le problème continu, nous avons vu dans le chapitre I que l'énergie libre vérifie

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}} = - \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{M_0}{\Sigma_i} |\nabla \mu_i|^2 dx.$$

La discrétisation des termes non-linéaires dans les équations de Cahn-Hilliard joue un rôle important pour l'établissement de l'estimation d'énergie. Une discrétisation naturelle est celle implicite définie pour $i = 1, 2$

$$\begin{aligned} \forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu, \quad \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \\ \forall \nu_h^c \in \mathcal{V}_h^c, \quad \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} f_i^F(\mathbf{c}_h^{n+1}) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx, \end{aligned} \quad (\text{III.24})$$

où

$$f_i^F(\mathbf{c}_h^{n+1}) = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \partial_j F(\mathbf{c}_h^{n+1})) \right)$$

et $(c_{3h}^{n+1}, \mu_{3h}^{n+1})$ vérifient les équations (III.22). On a ici $D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) = f_i^F(\mathbf{c}_h^{n+1})$. Par contre, cette discrétisation ne permet pas d'assurer l'estimation de l'énergie, ni même l'existence de la solution discrète. D'ailleurs, lorsque l'estimation n'est pas vérifiée, nous avons observé numériquement que si un des coefficients Σ_i est négatif alors l'algorithme de Newton pour résoudre le système de Cahn-Hilliard ne converge pas lors de l'apparition des points triples. Ceci est vraisemblablement dû au fait que la solution du problème discret n'existe pas.

Pour le problème diphasique (I.2), Eyre [41, 42] propose une autre discrétisation en temps afin d'avoir une estimation d'énergie et d'en déduire l'existence et l'unicité de la solution discrète. Pour cela, il décompose F en partie convexe F^+ et concave F^- comme suit

$$x^2(1-x)^2 = \underbrace{\left(x - \frac{1}{2}\right)^4}_{F^+} + \underbrace{\frac{1}{16}\left(1 - 2(2x-1)^2\right)}_{F^-}.$$

En implicitant la dérivée de F^+ et en explicitant celle de F^- dans les équations (I.2), l'estimation de l'énergie discrète s'écrit

$$\mathcal{F}_{\sigma, \varepsilon}^{\text{diph}}(c_h^{n+1}) - \mathcal{F}_{\sigma, \varepsilon}^{\text{diph}}(c_h^n) + \Delta t \int_{\Omega} M_0 |\nabla \mu_h^{n+1}|^2 dx \leq 0.$$

Nous allons nous inspirer de cette méthode, pour le problème de Cahn-Hilliard triphasique avec $F = F_0$.

On a vu précédemment que le système (III.21)-(III.22) est équivalent au système de Cahn-Hilliard (III.23) pour $i = 1, 2, 3$. Nous utiliserons les deux formulations dans la suite.

III.1.3.a Décomposition convexe/concave

Lorsque tous les coefficients Σ_i sont positifs, nous avons vu dans le chapitre I que le problème (I.10) est bien posé en prenant $F = F_0$ défini par

$$F_0(\mathbf{c}) = \frac{\Sigma_1}{2} c_1^2 (1 - c_1)^2 + \frac{\Sigma_2}{2} c_2^2 (1 - c_2)^2 + \frac{\Sigma_3}{2} c_3^2 (1 - c_3)^2, \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{S}.$$

Par analogie avec le problème diphasique, si les coefficients Σ_i sont positifs, F_0 se décompose en partie convexe et concave de la manière suivante

$$\begin{aligned} F_0^+(\mathbf{c}) &= \frac{\Sigma_1}{2} \left(c_1 - \frac{1}{2}\right)^4 + \frac{\Sigma_2}{2} \left(c_2 - \frac{1}{2}\right)^4 + \frac{\Sigma_3}{2} \left(c_3 - \frac{1}{2}\right)^4, \\ F_0^-(\mathbf{c}) &= \frac{\Sigma_1}{32} (1 - 2(2c_1 - 1)^2) + \frac{\Sigma_2}{32} (1 - 2(2c_2 - 1)^2) + \frac{\Sigma_3}{32} (1 - 2(2c_3 - 1)^2). \end{aligned}$$

Dans les équations (I.10), les dérivées partielles de F sont prises au temps t^{n+1} pour la partie convexe et au temps t^n pour la partie concave. Ainsi, en notant que $c_{ih}^{n+1} = \bar{c}_{ih}^{n+1} + c_{iDh}$ les équations discrétisées sont pour $i = 1, 2, 3$

$$\forall (\nu_h^\mu, \nu_h^c) \in \mathcal{V}_h^\mu \times \mathcal{V}_h^c$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \\ \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx, \end{aligned} \tag{III.25}$$

avec

$$\begin{aligned} D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) &= f_i^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) + f_i^{F_0^-}(\mathbf{c}_h^n) \\ &= \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \partial_j F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1})) \right) \\ &\quad + \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0^-(\mathbf{c}_h^n) - \partial_j F_0^-(\mathbf{c}_h^n)) \right). \end{aligned}$$

Ecrivons maintenant l'estimation de l'énergie discrète. On a, d'une part, par définition

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^n) &= \int_{\Omega} \frac{12}{\varepsilon} (F_0(\mathbf{c}_h^{n+1}) - F_0(\mathbf{c}_h^n)) dx \\ &\quad + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3}{8} \Sigma_i \varepsilon (|\nabla c_{ih}^{n+1}|^2 - |\nabla c_{ih}^n|^2) dx. \end{aligned} \quad (\text{III.26})$$

D'autre part, en prenant $\nu_h^\mu = \mu_{ih}^{n+1}$ et $\nu_h^c = \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t}$ dans (III.25), il vient pour $i = 1, 2, 3$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \mu_{ih}^{n+1} dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} |\nabla \mu_{ih}^{n+1}|^2 dx, \\ \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} dx &= \int_{\Omega} \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \partial_j F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1})) \right) \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} dx \\ &\quad + \int_{\Omega} \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0^-(\mathbf{c}_h^n) - \partial_j F_0^-(\mathbf{c}_h^n)) \right) \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} dx \\ &\quad + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \left(\frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \right) dx. \end{aligned} \quad (\text{III.27})$$

On remarque que

$$\nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla (c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n) = \frac{1}{2} (|\nabla c_{ih}^{n+1}|^2 - |\nabla c_{ih}^n|^2 + |\nabla c_{ih}^{n+1} - \nabla c_{ih}^n|^2).$$

En sommant les équations sur i et en notant que $\sum_{i=1}^3 (c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n) = 0$, on obtient alors

$$\begin{aligned} \Delta t \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} |\nabla \mu_{ih}^{n+1}|^2 dx &= \\ &- \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \partial_i F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1}) (c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n) dx - \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \partial_i F_0^-(\mathbf{c}_h^n) (c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n) dx \\ &- \frac{3}{8} \varepsilon \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \Sigma_i (|\nabla c_{ih}^{n+1}|^2 - |\nabla c_{ih}^n|^2) dx - \frac{3}{8} \varepsilon \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \Sigma_i |\nabla c_{ih}^{n+1} - \nabla c_{ih}^n|^2 dx. \end{aligned} \quad (\text{III.28})$$

En sommant ensuite les équations (III.26) et (III.28), il vient

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^n) + \Delta t \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^{\ell}}{\Sigma_i} |\nabla \mu_{ih}^{n+1}|^2 dx = \\
 - \int_{\Omega} \frac{3}{8} \varepsilon \sum_{i=1}^3 \Sigma_i |\nabla c_{ih}^{n+1} - \nabla c_{ih}^n|^2 dx \\
 + \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} [F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1}) - F_0^+(\mathbf{c}_h^n) - \nabla F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1}) \cdot (\mathbf{c}_h^{n+1} - \mathbf{c}_h^n)] dx \\
 + \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} [F_0^-(\mathbf{c}_h^{n+1}) - F_0^-(\mathbf{c}_h^n) - \nabla F_0^-(\mathbf{c}_h^n) \cdot (\mathbf{c}_h^{n+1} - \mathbf{c}_h^n)] dx.
 \end{aligned} \tag{III.29}$$

D'après les propriétés géométriques des fonctions convexes et concaves et la proposition I.2.3, tous les termes du membre de droite sont négatifs. On a donc l'estimation d'énergie discrète suivante

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^n) + \Delta t \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^{\ell}}{\Sigma_i} |\nabla \mu_{ih}^{n+1}|^2 dx \leq 0. \tag{III.30}$$

Nous comparons numériquement la discrétisation en temps définie par (III.24) avec $F = F_0$, notée IMPL- F_0 et celle définie par (III.25), notée SEMI-IMPL- F_0 . On s'intéresse au passage d'une bulle à travers une interface liquide/liquide. Nous avons choisi cette application où on résout les équations couplées Cahn-Hilliard/Navier-Stokes car c'est lors de l'apparition de points triples que nous avons observé des problèmes de convergence de l'algorithme de Newton (pour la résolution du système de Cahn-Hilliard) qui sont à l'origine de ce travail.

Le domaine de calcul (en m) est $[0; 8.4 \cdot 10^{-3}] \times [0; 6.3 \cdot 10^{-2}]$ (géométrie 3D axisymétrique) et le rayon de la bulle vaut $r_b = 4.2 \cdot 10^{-3}$ m. Nous faisons varier le pas de temps ($\Delta t = 10^{-3}, 10^{-4}$) et nous comparons les résultats à deux instants différents. Sur la figure III.1, nous remarquons que pour $\Delta t = 10^{-3}$, la discrétisation SEMI-IMPL- F_0 introduit une forte erreur en temps par rapport à celle implicite. Cette erreur diminue lorsque nous prenons $\Delta t = 10^{-4}$.

Finalement, la discrétisation SEMI-IMPL- F_0 assure l'estimation de l'énergie discrète mais nécessite de prendre des pas de temps beaucoup plus faibles que pour la discrétisation IMPL- F_0 qui sera utilisée en pratique. De plus, nous n'avons pas observé de problèmes de convergence de l'algorithme de Newton avec la discrétisation IMPL- F_0 lorsque tous les coefficients Σ_i sont positifs ce qui n'est pas le cas si $F = F_{\Lambda, 0}$ (§III.1.4).

III.1.3.b Existence et unicité de la solution discrète

Nous allons montrer l'existence de la solution du problème (III.25) en utilisant l'estimation de l'énergie discrète (III.30) et le théorème suivant qui est une application de la théorie du degré topologique en dimension finie [33].

Théorème III.1.3

Soit W un espace vectoriel de dimension finie sur \mathbb{R} et g une fonction continue de W vers W . On suppose qu'il existe une fonction continue h de $W \times [0; 1]$ dans W vérifiant

- 1. $h(\cdot, 1) = g$ et $h(\cdot, 0)$ est une fonction affine,*
 - 2. $\exists R > 0$ tel que $\forall (w, \delta) \in W \times [0; 1]$, si $h(w, \delta) = 0$ alors $|w|_W \neq R$,*
 - 3. l'équation $h(w, 0) = 0$ a une solution $w \in W$ telle que $|w|_W < R$,*
- alors il existe au moins une solution $w \in W$ telle que $g(w) = 0$ et $|w|_W < R$.*

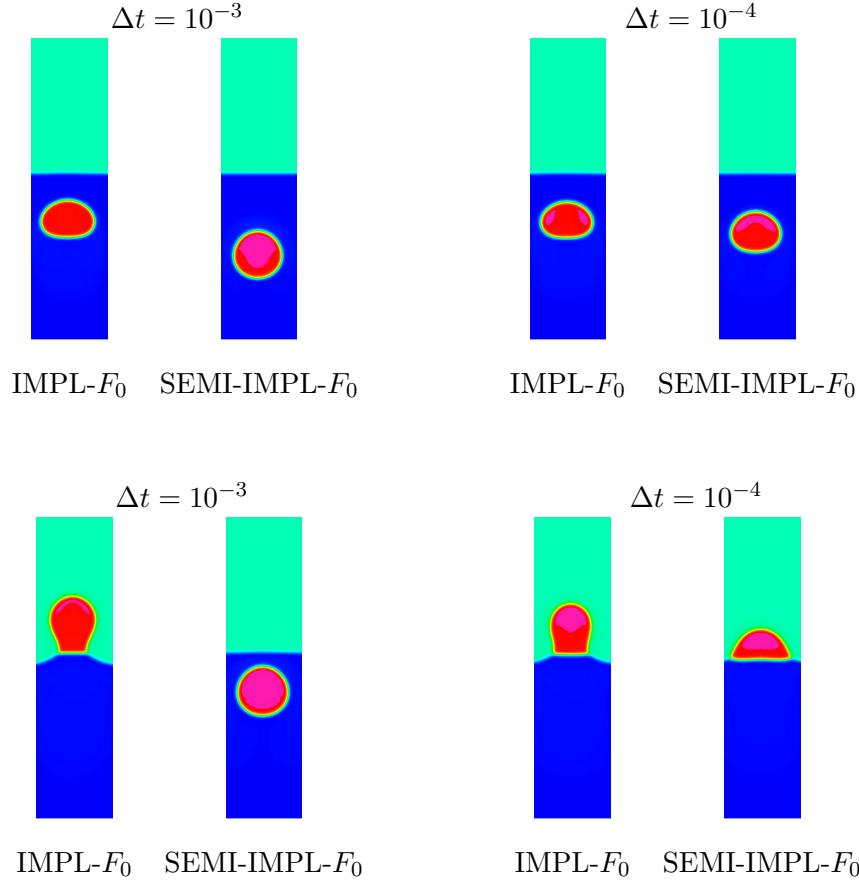


FIG. III.1 – Comparaison des discrétisations en temps IMPL- F_0 et SEMI-IMPL- F_0 avec $F = F_0$ pour différents pas de temps $\Delta t = 10^{-3}, 10^{-4}$ à $t = 0.08$ s et $t = 0.2$ s

On définit sur \mathbb{R}^{N^c} et \mathbb{R}^{N^μ} les normes suivantes [39]

$$\forall \mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N^c}, |\mathbf{C}|_{\mathcal{V}^c} = |\overline{c_h}|_{\mathcal{V}^c} \quad \text{et} \quad \forall \mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N^\mu}, |\mathbf{M}|_{\mathcal{V}^\mu} = |\mu_h|_{\mathcal{V}^\mu}$$

où \mathbf{C} et \mathbf{M} sont les vecteurs respectifs des composantes de $\overline{c_h}$ et μ_h dans les bases \mathcal{V}_h^c et \mathcal{V}_h^μ .

On pose $W = \mathbb{R}^{N^c} \times \mathbb{R}^{N^c} \times \mathbb{R}^{N^\mu} \times \mathbb{R}^{N^\mu}$ et on définit la norme sur W pour $w = (\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2, \mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2)$ par

$$\begin{aligned} |w|_W^2 &= |\mathbf{C}_1|_{\mathcal{V}^c}^2 + |\mathbf{C}_2|_{\mathcal{V}^c}^2 + |\mathbf{M}_1|_{\mathcal{V}^\mu}^2 + |\mathbf{M}_2|_{\mathcal{V}^\mu}^2 \\ &= |\overline{c_{1h}}|_{\mathcal{V}^c}^2 + |\overline{c_{2h}}|_{\mathcal{V}^c}^2 + |\mu_{1h}|_{\mathcal{V}^\mu}^2 + |\mu_{2h}|_{\mathcal{V}^\mu}^2 \end{aligned} \quad (\text{III.31})$$

avec

$$\begin{aligned} \mathcal{V}^c &= \{\nu^c \in H^1(\Omega) \mid \nu^c = 0 \text{ sur } \Gamma_D^c\}, \\ \mathcal{V}^\mu &= \{\nu^\mu \in H^1(\Omega)\}, \end{aligned}$$

auxquels on associe la norme H^1 .

On considère le problème discrétisé en temps (III.25). On introduit alors la fonction h comme suit

$$\begin{aligned} h : W \times [0; 1] &\rightarrow W \\ w = (\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2, \mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \delta) &\mapsto (\mathcal{R}_\delta^{\mu_1}, \mathcal{R}_\delta^{c_1}, \mathcal{R}_\delta^{\mu_2}, \mathcal{R}_\delta^{c_2}) \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}
 \mathcal{R}_{\delta I}^{\mu_1} &= \int_{\Omega} \frac{c_{1h}^{n+1} - c_{1h}^n}{\Delta t} \nu_I^{\mu} dx + \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^{\ell}}{\Sigma_1} \nabla \mu_{1h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_I^{\mu} dx, \text{ pour } 1 \leq I \leq N^{\mu}, \\
 \mathcal{R}_{\delta I}^{c_1} &= \int_{\Omega} \mu_{1h}^{n+1} \nu_I^c dx - \int_{\Omega} \delta \left(f_1^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) + f_1^{F_0^-}(\mathbf{c}_h^n) \right) \nu_I^c dx \\
 &\quad - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_1 \varepsilon \nabla c_{1h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_I^c dx, \text{ pour } 1 \leq I \leq N^c, \\
 \mathcal{R}_{\delta I}^{\mu_2} &= \int_{\Omega} \frac{c_{2h}^{n+1} - c_{2h}^n}{\Delta t} \nu_I^{\mu} dx + \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^{\ell}}{\Sigma_2} \nabla \mu_{2h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_I^{\mu} dx, \text{ pour } 1 \leq I \leq N^{\mu}, \\
 \mathcal{R}_{\delta I}^{c_2} &= \int_{\Omega} \mu_{2h}^{n+1} \nu_I^c dx - \int_{\Omega} \delta \left(f_2^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) + f_2^{F_0^-}(\mathbf{c}_h^n) \right) \nu_I^c dx \\
 &\quad - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_2 \varepsilon \nabla c_{2h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_I^c dx, \text{ pour } 1 \leq I \leq N^c.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{où } f_i^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) &= \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \partial_j F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1})) \right) \\
 f_i^{F_0^-}(\mathbf{c}_h^n) &= \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0^-(\mathbf{c}_h^n) - \partial_j F_0^-(\mathbf{c}_h^n)) \right).
 \end{aligned}$$

La fonction g est définie par

$$\begin{aligned}
 g &: W \rightarrow W \\
 w &\mapsto h(w, 1)
 \end{aligned}$$

Le problème $g(w) = 0$ est équivalent au problème (III.25).

On vérifie maintenant que les fonctions g et h satisfont les hypothèses du théorème III.1.3.

1. On a bien $h(\cdot, 1) = g$ et $h(\cdot, 0)$ est une fonction affine.
2. Si on suppose que $h(w, \delta) = 0$ alors en reprenant les calculs du paragraphe précédent, on a l'estimation de l'énergie discrète suivante

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, \delta}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, \delta}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^n) + \Delta t \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^{\ell}}{\Sigma_i} |\nabla \mu_{ih}^{n+1}|^2 dx \leq 0 \quad (\text{III.32})$$

$$\text{avec } \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, \delta}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^k) = \int_{\Omega} \delta \frac{12}{\varepsilon} F_0(\mathbf{c}_h^k) + \sum_{i=1}^3 \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_i |\nabla c_{ih}^k|^2 dx.$$

On obtient alors

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, \delta}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^{n+1}) + \sum_{i=1}^3 \Delta t \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^{\ell}}{\Sigma_i} |\nabla \mu_{ih}^{n+1}|^2 dx \leq \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, \delta}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^n).$$

Comme $0 \leq \delta \leq 1$, $F = F_0$ est positive (on a supposé $\Sigma_i > 0$) et en sachant que $c_{ih}^n \in H^1(\Omega)$ alors il existe k_1 telle que

$$0 < \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, \delta}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^{n+1}) + \sum_{i=1}^3 \Delta t \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^{\ell}}{\Sigma_i} |\nabla \mu_{ih}^{n+1}|^2 dx \leq k_1.$$

En particulier, on a pour $i = 1, 2, 3$

$$|\nabla c_{ih}^{n+1}|_{L^2} < k_1,$$

et il existe k_2 telle que

$$|\nabla \mu_{ih}^{n+1}|_{L^2} < k_2.$$

En remarquant que $m(c_{ih}^{n+1}) < +\infty$, on a

$$|c_{ih}^{n+1}|_{\mathcal{V}^c} < +\infty.$$

On définit θ_h , une fonction appartenant à \mathcal{V}_h^μ telle que $m(\theta_h) = 1$ et telle que son support est disjoint de celui des fonctions de base du bord. On a alors

$$m(\mu_{ih}^{n+1}\theta_h) = \int_{\Omega} \delta D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \theta_h dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \theta_h dx.$$

Pour montrer que $m(\mu_{ih}^{n+1}\theta_h) < +\infty$, on utilise un argument similaire à celui employé pour le problème continu dans le paragraphe II.1 pour les termes non linéaires et le fait que les normes H^1 de c_{ih}^{n+1} et θ_h sont finies. Enfin, en utilisant (III.31), on obtient

$$|w|_W < K(k_1, k_2).$$

Ainsi, il existe $R > K(k_1, k_2) > 0$ telle que $\forall (w, \delta) \in W \times [0, 1]$, si $h(w, \delta) = 0$ alors $|w|_W \neq R$.

3. Le problème $h(w, 0) = 0$ peut s'écrire sous la forme pour $i = 1, 2, 3$:

Trouver $(\bar{c}_{ih}^{n+1}, \mu_{ih}^{n+1}) \in \mathcal{V}_h^c \times \mathcal{V}_h^\mu$ tel que $\forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu, \forall \nu_h^c \in \mathcal{V}_h^c$,

$$a_i((\bar{c}_{ih}^{n+1}, \mu_{ih}^{n+1}), (\nu_h^c, \nu_h^\mu)) = \int_{\Omega} \bar{c}_{ih}^n \nu_h^\mu dx - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{iDh} \cdot \nabla \nu_h^c dx \quad (\text{III.33})$$

où

$$\begin{aligned} a_i((\bar{c}_{ih}^{n+1}, \mu_{ih}^{n+1}), (\nu_h^c, \nu_h^\mu)) &= \int_{\Omega} \left[\bar{c}_{ih}^{n+1} \nu_h^\mu + \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \Delta t \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu \right] dx \\ &\quad + \int_{\Omega} \left[\frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla \bar{c}_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c - \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c \right] dx. \end{aligned}$$

Pour montrer l'existence d'une solution de (III.33), nous allons travailler sur un problème modifié afin d'avoir une propriété de coercivité. On introduit les espaces suivants

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{h,m}^c &= \{\varphi_h \in \mathcal{V}_h^c \mid m(\varphi_h) = 0\}, \\ \mathcal{V}_{h,\theta}^\mu &= \{\psi_h \in \mathcal{V}_h^\mu \mid m(\psi_h \theta_h) = 0\}, \end{aligned}$$

où θ_h est une fonction appartenant à \mathcal{V}_h^μ telle que $m(\theta_h) = 1$ et son support est disjoint de celui des fonctions de base du bord. On cherche maintenant l'existence du problème suivant :

Trouver $(d_{ih}, \xi_{ih}) \in \mathcal{V}_{h,m}^c \times \mathcal{V}_{h,\theta}^\mu$ tel que $\forall \varphi_h \in \mathcal{V}_{h,m}^c, \forall \psi_h \in \mathcal{V}_{h,\theta}^\mu$

$$\begin{aligned} \tilde{a}_i((d_{ih}, \xi_{ih}), (\varphi_h, \psi_h)) &= \int_{\Omega} (\bar{c}_{ih}^n - m(\bar{c}_{ih}^n) \theta_h) \psi_h dx - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{iDh} \cdot \nabla \varphi_h dx \\ &\quad - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon m(\bar{c}_{ih}^n) \nabla \theta_h \cdot \nabla \varphi_h dx \quad (\text{III.34}) \end{aligned}$$

où

$$\tilde{a}_i((d_{ih}, \xi_{ih}), (\varphi_h, \psi_h)) = \int_{\Omega} \left[d_{ih} \psi_h + \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \Delta t \nabla \xi_{ih} \cdot \nabla \psi_h \right] dx + \int_{\Omega} \left[\frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla d_{ih} \cdot \nabla \varphi_h - \xi_{ih} \varphi_h \right] dx.$$

La forme bilinéaire $\tilde{a} = \sum_{i=1}^3 \tilde{a}_i$ est continue sur $(\mathcal{V}_{h,m}^c \times \mathcal{V}_{h,\theta}^\mu)^3$. De plus, grâce à l'inégalité de Poincaré-Wirtinger et à la proposition I.2.3, elle est coercive et on a donc l'existence d'une solution

(d_{ih}, ξ_{ih}) au problème (III.34) pour $i = 1, 2, 3$.

Montrons maintenant l'existence d'une solution au problème (III.33) à partir du problème (III.34). Soient $\nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu$ et $\nu_h^c \in \mathcal{V}_h^c$. On pose

$$\begin{aligned}\varphi_h &= \nu_h^c - m(\nu_h^c)\theta_h, \\ \psi_h &= \nu_h^\mu - m(\nu_h^\mu)\theta_h.\end{aligned}$$

de sorte que $\varphi_h \in \mathcal{V}_{h,m}^c$ et $\psi_h \in \mathcal{V}_{h,\theta}^\mu$.

D'après (III.34), on a alors, en prenant $\psi_h = 0$,

$$\begin{aligned}- \int_{\Omega} \xi_{ih}(\nu_h^c - m(\nu_h^c)\theta_h) dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla d_{ih} \cdot \nabla (\nu_h^c - m(\nu_h^c)\theta_h) dx = \\ - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{iDh} \cdot \nabla (\nu_h^c - m(\nu_h^c)\theta_h) dx - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon m(\overline{c_{ih}^n}) \nabla \theta_h \cdot \nabla (\nu_h^c - m(\nu_h^c)\theta_h) dx.\end{aligned}\quad (\text{III.35})$$

Comme $\xi_{ih} \in \mathcal{V}_{h,\theta}^\mu$ alors $m(\xi_{ih}\theta_h) = 0$ et on obtient

$$\begin{aligned}- \int_{\Omega} \xi_{ih} \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla d_{ih} \cdot \nabla \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon m(\overline{c_{ih}^n}) \nabla \theta_h \cdot \nabla \nu_h^c dx = \\ - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{iDh} \cdot \nabla \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon m(\nabla c_{iDh} \cdot \nabla \theta_h) \nu_h^c dx \\ + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon m(\overline{c_{ih}^n}) m(|\nabla \theta_h|^2) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon m(\nabla d_{ih} \cdot \nabla \theta_h) \nu_h^c dx.\end{aligned}\quad (\text{III.36})$$

En posant

$$\begin{aligned}c_{ih}^{n+1} &= d_{ih} + m(\overline{c_{ih}^n})\theta_h, \\ \mu_{ih}^{n+1} &= \xi_{ih} + \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \left(m(\nabla c_{iDh} \cdot \nabla \theta_h) + m(|\nabla \theta_h|^2) + m(\nabla d_{ih} \cdot \nabla \theta_h) \right),\end{aligned}$$

il vient pour tout $\nu_h^c \in \mathcal{V}_h^c$

$$- \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx = - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{iDh} \cdot \nabla \nu_h^c dx$$

avec $c_{ih}^{n+1} \in \mathcal{V}_h^c$ et $\mu_{ih}^{n+1} \in \mathcal{V}_h^\mu$.

De plus, en prenant $\varphi_h = 0$ dans (III.34), on a aussi

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} d_{ih}(\nu_h^\mu - m(\nu_h^\mu)\theta_h) dx + \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \Delta t \nabla \xi_{ih} \cdot \nabla (\nu_h^\mu - m(\nu_h^\mu)\theta_h) dx = \\ \int_{\Omega} (\overline{c_{ih}^n} - m(\overline{c_{ih}^n})\theta_h)(\nu_h^\mu - m(\nu_h^\mu)\theta_h) dx.\end{aligned}$$

Sachant que d_{ih} est à moyenne nulle et que $\nabla \xi_{ih} = \nabla \mu_{ih}^{n+1}$, on obtient

$$\int_{\Omega} d_{ih} \nu_h^\mu dx + \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \Delta t \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx = \int_{\Omega} \overline{c_{ih}^n} \nu_h^\mu dx - \int_{\Omega} m(\overline{c_{ih}^n}) \theta_h \nu_h^\mu dx.$$

Comme $c_{ih}^{n+1} = d_{ih} + m(\overline{c_{ih}^n})\theta_h$, on a finalement pour tout $\nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu$

$$\int_{\Omega} c_{ih}^{n+1} \nu_h^\mu dx + \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \Delta t \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx = \int_{\Omega} \overline{c_{ih}^n} \nu_h^\mu dx.$$

On a donc montré l'existence d'une solution au problème $h(w, 0) = 0$.

On a vérifié les hypothèses 1., 2., 3. du théorème III.1.3, on peut donc conclure sur l'existence d'une solution au problème (III.25).

Nous allons maintenant montrer l'unicité de la solution. Pour cela, on suppose qu'il existe deux solutions $(\mathbf{c}_h^{n+1}, \boldsymbol{\mu}_h^{n+1})$ et $(\mathbf{d}_h^{n+1}, \boldsymbol{\xi}_h^{n+1})$ au problème (III.25). En prenant la différence des équations vérifiées par chacune des solutions, on a $\forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu, \forall \nu_h^c \in \mathcal{V}_h^c$,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - d_{ih}^{n+1}}{\Delta t} \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla(\mu_{ih}^{n+1} - \xi_{ih}^{n+1}) \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \\ \int_{\Omega} (\mu_{ih}^{n+1} - \xi_{ih}^{n+1}) \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} (f_i^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) - f_i^{F_0^+}(\mathbf{d}_h^{n+1})) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla(c_{ih}^{n+1} - d_{ih}^{n+1}) \cdot \nabla \nu_h^c dx, \end{aligned}$$

où

$$f_i^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \partial_j F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1})) \right).$$

Prenons $\nu_h^\mu = \mu_{ih}^{n+1} - \xi_{ih}^{n+1}$ et $\nu_h^c = \frac{c_{ih}^{n+1} - d_{ih}^{n+1}}{\Delta t}$ dans les équations précédentes

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - d_{ih}^{n+1}}{\Delta t} (\mu_{ih}^{n+1} - \xi_{ih}^{n+1}) dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} |\nabla(\mu_{ih}^{n+1} - \xi_{ih}^{n+1})|^2 dx, \\ \int_{\Omega} (\mu_{ih}^{n+1} - \xi_{ih}^{n+1}) \frac{c_{ih}^{n+1} - d_{ih}^{n+1}}{\Delta t} dx &= \int_{\Omega} (f_i^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) - f_i^{F_0^+}(\mathbf{d}_h^{n+1})) \frac{c_{ih}^{n+1} - d_{ih}^{n+1}}{\Delta t} dx \\ &\quad + \int_{\Omega} \frac{3}{4\Delta t} \Sigma_i \varepsilon |\nabla(c_{ih}^{n+1} - d_{ih}^{n+1})|^2 dx. \end{aligned}$$

Ainsi, en sommant les équations sur i et en notant que $\sum_{i=1}^3 (c_{ih}^{n+1} - d_{ih}^{n+1}) = 0$, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \Delta t \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} |\nabla(\mu_{ih}^{n+1} - \xi_{ih}^{n+1})|^2 dx &+ \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon |\nabla(c_{ih}^{n+1} - d_{ih}^{n+1})|^2 dx \\ &+ \frac{12}{\varepsilon} \int_{\Omega} (\nabla F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \nabla F_0^+(\mathbf{d}_h^{n+1})) \cdot (\mathbf{c}_h^{n+1} - \mathbf{d}_h^{n+1}) dx = 0. \quad (\text{III.37}) \end{aligned}$$

Les deux premiers termes sont positifs ou nuls d'après la proposition I.2.3 ainsi que le dernier terme puisque la fonction F_0^+ est convexe, ce qui permet de conclure sur l'unicité des solutions.

III.1.4 Estimation d'énergie pour $F = F_{\Lambda,0}$

On s'intéresse maintenant au modèle de Cahn-Hilliard avec $F = F_{\Lambda,0}$ défini par

$$F_{\Lambda,0} = F_0 + 3\Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2.$$

Nous allons chercher une discrétisation en temps pour le terme d'ordre 6

$$P(\mathbf{c}) = 3\Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2$$

permettant d'avoir une estimation de l'énergie discrète similaire à (III.30). Pour cela, on s'inspire des travaux de Kim *et al.* [69] où les termes non-linéaires au temps t^{n+1} sont approchés par des fonctions qui dépendent de \mathbf{c}^{n+1} et \mathbf{c}^n .

Afin d'obtenir une estimation d'énergie, nous cherchons des fonctions p_1 , p_2 et p_3 telles que $p_i(x, x) = \frac{\partial P}{\partial c_i}(x)$ et

$$P(\mathbf{c}_h^{n+1}) - P(\mathbf{c}_h^n) - p_1(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n)(c_{1h}^{n+1} - c_{1h}^n) - p_2(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n)(c_{2h}^{n+1} - c_{2h}^n) - p_3(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n)(c_{3h}^{n+1} - c_{3h}^n) \leq 0.$$

On pose $c_i = c_{ih}^{n+1}$, $d_i = c_{ih}^n$ et $\delta_i = c_i - d_i$.

Calculons $c_1^2 c_2^2 c_3^2 - d_1^2 d_2^2 d_3^2$ sous la forme

$$\begin{aligned} c_1^2 c_2^2 c_3^2 - d_1^2 d_2^2 d_3^2 &= \frac{1}{3} (c_1^2 c_2^2 c_3^2 - (c_1 - \delta_1)^2 d_2^2 d_3^2) + \frac{1}{3} (c_1^2 c_2^2 c_3^2 - (c_2 - \delta_2)^2 d_1^2 d_3^2) \\ &\quad + \frac{1}{3} (c_1^2 c_2^2 c_3^2 - (c_3 - \delta_3)^2 d_1^2 d_2^2). \end{aligned}$$

En remarquant que

$$\begin{aligned} c_1^2 c_2^2 c_3^2 - (c_1 - \delta_1)^2 d_2^2 d_3^2 &= (2c_1 - \delta_1) d_2^2 d_3^2 \delta_1 + \frac{1}{2} (2c_2 - \delta_2) c_1^2 d_3^2 \delta_2 + \frac{1}{2} (2c_2 - \delta_2) c_1^2 c_3^2 \delta_2 \\ &\quad + \frac{1}{2} (2c_3 - \delta_3) c_1^2 d_2^2 \delta_3 + \frac{1}{2} (2c_3 - \delta_3) c_1^2 c_2^2 \delta_3, \end{aligned}$$

on obtient

$$\begin{aligned} c_1^2 c_2^2 c_3^2 - d_1^2 d_2^2 d_3^2 &= \frac{1}{3} \left[d_2^2 d_3^2 + \frac{1}{2} c_2^2 d_3^2 + \frac{1}{2} d_2^2 c_3^2 + c_2^2 c_3^2 \right] (2c_1 - \delta_1) \delta_1 \\ &\quad + \frac{1}{3} \left[d_1^2 d_3^2 + \frac{1}{2} c_1^2 d_3^2 + \frac{1}{2} d_1^2 c_3^2 + c_1^2 c_3^2 \right] (2c_2 - \delta_2) \delta_2 \\ &\quad + \frac{1}{3} \left[d_1^2 d_2^2 + \frac{1}{2} c_1^2 d_2^2 + \frac{1}{2} d_1^2 c_2^2 + c_1^2 c_2^2 \right] (2c_3 - \delta_3) \delta_3. \end{aligned}$$

Ainsi en posant

$$p_i(\mathbf{c}, \mathbf{d}) = 2\Lambda c_i \left[d_j^2 d_k^2 + \frac{1}{2} c_j^2 d_k^2 + \frac{1}{2} d_j^2 c_k^2 + c_j^2 c_k^2 \right]$$

il vient

$$P(\mathbf{c}) - P(\mathbf{d}) - p_1(\mathbf{c}, \mathbf{d})\delta_1 - p_2(\mathbf{c}, \mathbf{d})\delta_2 - p_3(\mathbf{c}, \mathbf{d})\delta_3 \leq 0, \quad (\text{III.38})$$

et

$$p_i(\mathbf{c}, \mathbf{c}) = \frac{\partial P}{\partial c_i}(\mathbf{c}).$$

Finalement, on considère la discrétisation en temps suivante

$$\forall (\nu_h^\mu, \nu_h^c) \in \mathcal{V}_h^\mu \times \mathcal{V}_h^c$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \\ \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} f_i^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} f_i^{F_0^-}(\mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx \\ &\quad + \int_{\Omega} f_i^P(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx. \end{aligned} \quad (\text{III.39})$$

$$\begin{aligned} \text{où } f_i^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) &= \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \partial_j F_0^+(\mathbf{c}_h^{n+1})) \right), \\ f_i^{F_0^-}(\mathbf{c}_h^n) &= \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0^-(\mathbf{c}_h^n) - \partial_j F_0^-(\mathbf{c}_h^n)) \right), \\ f_i^P(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) &= \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (p_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) - p_j(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n)) \right). \end{aligned}$$

On a ici $D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) = f_i^{F_0^+}(\mathbf{c}_h^{n+1}) + f_i^{F_0^-}(\mathbf{c}_h^n) + f_i^P(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n)$.

Si les coefficients Σ_i sont positifs, en reprenant la démarche du paragraphe précédent et grâce à (III.38), on obtient l'estimation d'énergie suivante pour $F = F_{\Lambda,0}$

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^n) + \Delta t \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} |\nabla \mu_{ih}^{n+1}|^2 dx \leq 0.$$

et l'existence de la solution discrète au problème (III.39).

Nous comparons numériquement la discrétisation implicite du terme P et celle semi-implicite sur l'exemple du paragraphe III.1.3.a. Comme la discrétisation SEMI-IMPL- F_0 pour les termes d'ordre 4 introduit une forte erreur en temps, nous utilisons la discrétisation IMPL- F_0 même si dans ce cas l'estimation de l'énergie discrète n'est pas vérifiée.

Ainsi, nous comparons la discrétisation (III.24) pour $F = F_{\Lambda,0}$, notée IMPL- P avec la discrétisation suivante, notée SEMI-IMPL- P , $\forall (\nu_h^\mu, \nu_h^c) \in \mathcal{V}_h^\mu \times \mathcal{V}_h^c$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \\ \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} f_i^{F_0}(\mathbf{c}_h^{n+1}) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} f_i^P(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx, \end{aligned} \quad (\text{III.40})$$

$$\begin{aligned} \text{où } f_i^{F_0}(\mathbf{c}_h^{n+1}) &= \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_0(\mathbf{c}_h^{n+1}) - \partial_j F_0(\mathbf{c}_h^{n+1})) \right), \\ f_i^P(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) &= \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (p_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) - p_j(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n)) \right). \end{aligned}$$

Lorsque $\Delta t = 10^{-3}$, l'algorithme de Newton n'a pas convergé pour le schéma IMPL- P quand la bulle a atteint l'interface alors que le calcul s'est poursuivi pour le schéma SEMI-IMPL- P . Sur la figure III.2, nous observons que la discrétisation SEMI-IMPL- P entraîne peu d'erreurs en temps lorsque le terme P devient non nul (existence des points triples).

Généralement, le potentiel $F = F_{\Lambda,0}$ est utilisé si un des coefficients Σ_i est négatif. Dans ce cas, la discrétisation semi-implicite en temps pour le terme P d'ordre 6 reste valable pour établir l'estimation de l'énergie libre discrète. Par contre, pour les termes d'ordre 4 du polynôme F_0 , il faudrait trouver une discrétisation en temps qui permette l'établissement de l'estimation de l'énergie quelque soit le signe des coefficients Σ_i et qui ne nécessite pas des pas de temps très faibles. Ce travail reste à faire. Cependant, la discrétisation en temps (III.40) a permis de simuler par exemple le passage d'une bulle d'air à travers une interface eau/huile où l'un des coefficients Σ_i est négatif (§III.1.5) contrairement à la discrétisation implicite (III.24) avec $F = F_{\Lambda,0}$ où l'algorithme de Newton ne converge pas lorsque la bulle atteint l'interface.

III.1.5 Passage d'une bulle d'air à travers une interface eau/huile

On considère une bulle d'air dans un bain stratifié eau/huile. Cette simulation est à l'origine du travail précédent sur l'estimation de l'énergie et l'existence de la solution discrète.

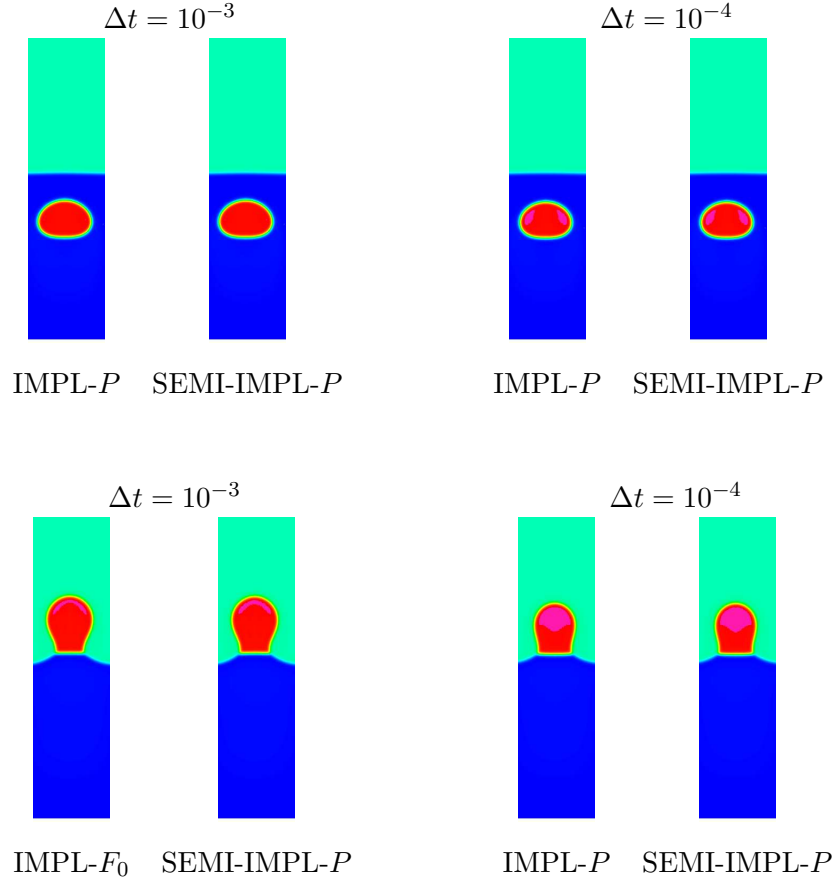


FIG. III.2 – Comparaison des discrétisations en temps IMPL- P et SEMI-IMPL- P pour le terme P en prenant la discrétisation IMPL- F_0 pour les termes d'ordre 4 de F , pour différents pas de temps $\Delta t = 10^{-3}, 10^{-4}$ à $t = 0.08$ s et $t = 0.2$ s

Les tensions de surface sont

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{eau/air}} &= 7. \cdot 10^{-2} \text{ N.m}^{-1}, \\ \sigma_{\text{huile/air}} &= 2. \cdot 10^{-2} \text{ N.m}^{-1}, \\ \sigma_{\text{huile/air}} &= 3. \cdot 10^{-2} \text{ N.m}^{-1}.\end{aligned}$$

Le coefficient Σ_{huile} est négatif. Les autres propriétés physiques sont

$$\begin{aligned}\varrho_{\text{air}} &= 1.29 \text{ kg.m}^{-3}, & \eta_{\text{air}} &= 1.85 \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}, \\ \varrho_{\text{eau}} &= 1000 \text{ kg.m}^{-3}, & \eta_{\text{eau}} &= 10^{-3} \text{ Pa.s}, \\ \varrho_{\text{huile}} &= 970 \text{ kg.m}^{-3}, & \eta_{\text{huile}} &= 5 \cdot 10^{-2} \text{ Pa.s}.\end{aligned}$$

Le problème est résolu en géométrie 3D axisymétrique sur un domaine cylindrique. Le domaine de calcul (en m) est $[10^{-5}; 1.25 \cdot 10^{-2}] \times [0; 7. \cdot 10^{-2}]$ et le rayon de la bulle vaut $r_b = 5 \cdot 10^{-3}$ m.

On résout les équations de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes couplées. La discrétisation des termes non-linéaires pour les équations de Cahn-Hilliard est celle proposée dans (III.40). Nous avons pris $\Delta t = 5. \cdot 10^{-4}$.

Sur la figure III.3, on remarque que la taille de la bulle diminue alors que son volume V , calculé par $V = \int_{\Omega} c_{1h}^n dx$ reste constant pour tout $n > 0$. Cette diminution vient du fait que les valeurs du

paramètre d'ordre c_1 , représentant la bulle, sont légèrement supérieures à 0 en dehors de la bulle et supérieures à 1 dans celle-ci (figure III.4). Nous avons observé que ce comportement est atténué lorsqu'on raffine le maillage.

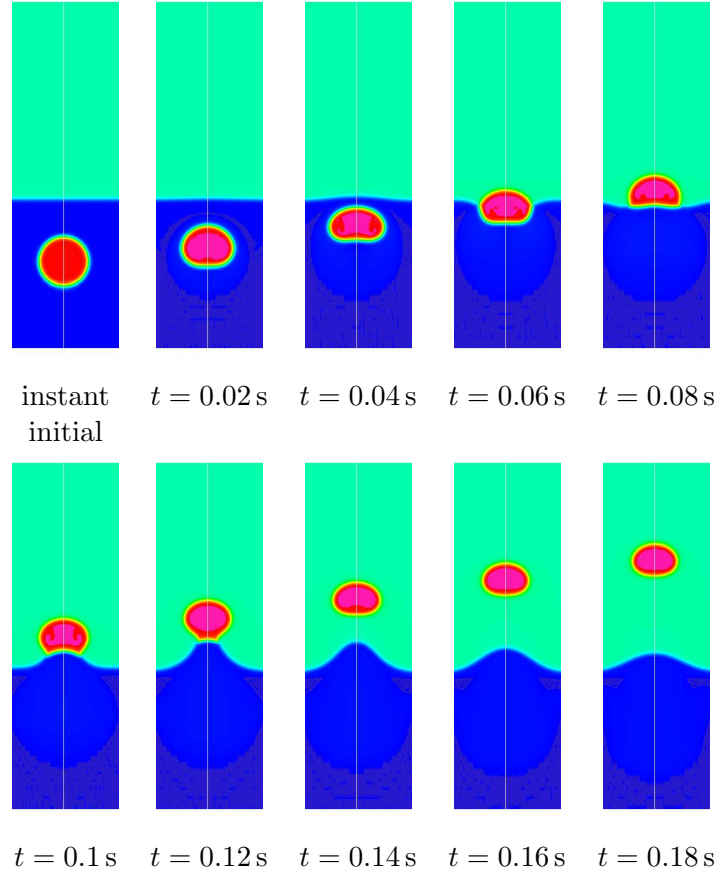


FIG. III.3 – Evolution d'une bulle d'air dans un bain stratifié eau/huile

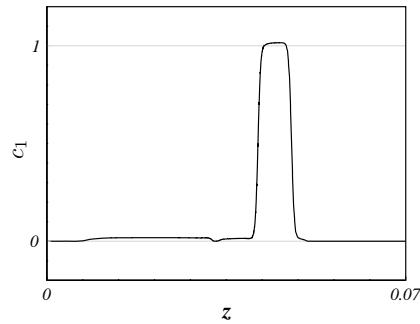


FIG. III.4 – Coupe du paramètre d'ordre c_1 (bulle) à $t = 0.15$ s en $r = 0.001$ m

III.2 Discrétisation du modèle couplé (III.1)-(III.5)

On s'intéresse maintenant à la discrétisation du problème couplé de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes anisotherme. Nous donnons, tout d'abord, la démarche dans un pas de temps puis les discrétisations spatiales des équations.

III.2.1 Discrétisation en temps

La discrétisation temporelle prise pour le problème couplé (III.1)-(III.5) est semi-implicite afin de découpler les équations de Cahn-Hilliard et de Navier-Stokes dans un pas de temps. Ainsi, on résout tout d'abord les équations de Cahn-Hilliard en prenant la vitesse d'advection au temps t^n . Les solutions \mathbf{c}^{n+1} et $\boldsymbol{\mu}^{n+1}$ obtenues sont ensuite utilisées pour le calcul de la force capillaire dans les équations de Navier-Stokes.

Les dérivées temporelles sont discrétisées avec un schéma d'Euler implicite d'ordre 1. Dans les équations de Navier-Stokes, le terme $(u \cdot \nabla)u$ est linéarisé en prenant la vitesse d'advection explicite.

Pour simplifier les notations, on écrit $\varrho^{n+1} = \varrho(\mathbf{c}^{n+1})$ dans la suite, ainsi que pour les autres paramètres physiques (η, c_p, λ) .

Finalement, la démarche dans un pas de temps est la suivante :

1. calcul de \mathbf{c}^{n+1} , $\boldsymbol{\mu}^{n+1}$ connaissant \mathbf{c}^n , u^n

$$\begin{aligned} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} + u^n \cdot \nabla c_i^{n+1} &= \nabla \cdot \left(\frac{M_0^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_i^{n+1} \right), \text{ pour } i = \{1, 2\}, \\ \mu_i^{n+1} &= D_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i^{n+1}, \text{ pour } i = \{1, 2\} \end{aligned} \quad (\text{III.41})$$

$$\text{où } \ell = n \text{ ou } n+1 \text{ et } D_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (d_i(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n) - d_j(\mathbf{c}^{n+1}, \mathbf{c}^n)) \right).$$

On pose ensuite

$$c_3^{n+1} = 1 - c_1^{n+1} - c_2^{n+1}, \quad \mu_3^{n+1} = -\Sigma_3 \left(\frac{1}{\Sigma_1} \mu_1^{n+1} + \frac{1}{\Sigma_2} \mu_2^{n+1} \right), \quad (\text{III.42})$$

2. calcul de u^{n+1} , p^{n+1} connaissant \mathbf{c}^{n+1} , $\boldsymbol{\mu}^{n+1}$ et u^n

$$\begin{aligned} \nabla \cdot u^{n+1} &= 0, \\ \varrho^{n+1} \left(\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + u^n \cdot \nabla u^{n+1} \right) &= \nabla \cdot (2\eta^{n+1} D(u^{n+1})) - \nabla p^{n+1} + \sum_{i=1}^3 \mu_i^{n+1} \nabla c_i^{n+1} + \varrho^{n+1} g \end{aligned} \quad (\text{III.43})$$

3. calcul de T^{n+1} connaissant T^n , u^{n+1} et \mathbf{c}^{n+1}

$$\varrho^{n+1} c_p^{n+1} \left(\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + u^{n+1} \cdot \nabla T^{n+1} \right) = \nabla \cdot (\lambda^{n+1} \nabla T^{n+1}). \quad (\text{III.44})$$

III.2.2 Discrétisation spatiale

Nous présentons ici la discrétisation des équations de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes couplées et du bilan d'énergie. Nous discutons ensuite du choix des éléments pour l'approximation des inconnues afin que le problème discret couplé vérifie des propriétés analogues à celles du problème continu.

III.2.2.a Equations de Cahn-Hilliard (III.41)

Pour les équations de Cahn-Hilliard (III.41), on reprend la discrétisation spatiale présentée dans le paragraphe III.1.2. Les définitions des espaces \mathcal{V}_h^c et \mathcal{V}_h^μ sont inchangées. En ajoutant le terme d'advection, on obtient le problème suivant :

Trouver $[\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}] \in (\mathbb{R}^{N^c})^2 \times (\mathbb{R}^{N^\mu})^2$ tel que

$$\begin{cases} \mathcal{R}^{\mu_1}(\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}) = 0, \\ \mathcal{R}^{c_1}(\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}) = 0, \\ \mathcal{R}^{\mu_2}(\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}) = 0, \\ \mathcal{R}^{c_2}(\mathbf{C}_1^{n+1}, \mathbf{C}_2^{n+1}, \mathbf{M}_1^{n+1}, \mathbf{M}_2^{n+1}) = 0, \end{cases} \quad (\text{III.45})$$

où les inconnues \mathbf{C}_i^{n+1} et \mathbf{M}_i^{n+1} sont les vecteurs respectifs des composantes de c_{ih}^{n+1} et μ_{ih}^{n+1} dans les bases de \mathcal{V}_h^c et \mathcal{V}_h^μ . Les fonctions non linéaires \mathcal{R}^{c_i} et \mathcal{R}^{μ_i} à valeurs respectivement dans \mathbb{R}^{N^c} et \mathbb{R}^{N^μ} sont définies ici par

$\forall 1 \leq I \leq N^\mu$,

$$\mathcal{R}_I^{\mu_i} = \int_{\Omega} \frac{\overline{c}_{ih}^{n+1} - \overline{c}_{ih}^n}{\Delta t} \nu_I^\mu dx + \int_{\Omega} u_h^n \cdot \nabla c_{ih}^{n+1} \nu_I^\mu dx + \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_I^\mu dx,$$

$\forall 1 \leq I \leq N^c$,

$$\mathcal{R}_I^{c_i} = \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_I^c dx - \int_{\Omega} D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}^n) \nu_I^c dx - \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{1h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_I^c dx.$$

De plus, on pose comme dans le paragraphe III.1.2

$$c_{3h}^{n+1} = 1 - c_{1h}^{n+1} - c_{2h}^{n+1} \quad \mu_{3h}^{n+1} = - \left(\frac{\Sigma_3}{\Sigma_1} \mu_{1h}^{n+1} + \frac{\Sigma_3}{\Sigma_2} \mu_{2h}^{n+1} \right). \quad (\text{III.46})$$

III.2.2.b Equations de Navier-Stokes

Pour écrire la formulation variationnelle des équations (III.43), on introduit les espaces suivants

$$\begin{aligned} U &= \left\{ v \in H^1(\Omega)^d \mid v = u_D \text{ sur } \Gamma_D^u \text{ et } v \cdot n = 0 \text{ sur } \Gamma_t^u \right\}, \\ X &= \left\{ v \in H^1(\Omega)^d \mid v = 0 \text{ sur } \Gamma_D^u \text{ et } v \cdot n = 0 \text{ sur } \Gamma_t^u \right\}, \\ Q &= \left\{ q \in L^2(\Omega) \right\}. \end{aligned}$$

Pour simplifier les notations, on écrit dans la suite $E^{n+1} = \sum_{i=1}^3 \mu_i^{n+1} \nabla c_i^{n+1} + \varrho^{n+1} g$.

En utilisant les conditions au bord (III.10)-(III.12), la formulation variationnelle du problème (III.43) s'écrit :

Trouver $u^{n+1} \in U$ et $p^{n+1} \in Q$ tels que

$$\begin{aligned} \forall v \in X, \quad & \int_{\Omega} \varrho^{n+1} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} v dx + \int_{\Omega} \varrho^{n+1} u^n \cdot \nabla u^{n+1} v dx = \\ & - \int_{\Omega} 2\eta^{n+1} D(u^{n+1}) : \nabla v dx + \int_{\Omega} p^{n+1} \nabla \cdot v dx + \int_{\Omega} E^{n+1} v dx, \\ \forall q \in Q, \quad & \int_{\Omega} \nabla \cdot u^{n+1} q dx = 0. \end{aligned}$$

On introduit les applications bilinéaires et linéaires suivantes

$$\begin{aligned}
 m^{n+1}(\cdot, \cdot) &: H^1(\Omega)^d \times H^1(\Omega)^d \rightarrow \mathbb{R}, \\
 (u, v) &\mapsto \int_{\Omega} \varrho^{n+1} uv \, dx, \\
 a^{n+1}(\cdot, \cdot) &: H^1(\Omega)^d \times H^1(\Omega)^d \rightarrow \mathbb{R}, \\
 (u, v) &\mapsto \int_{\Omega} 2\eta^{n+1} D(u) : \nabla v \, dx + \int_{\Omega} \varrho^{n+1} u^n \cdot \nabla uv \, dx, \\
 b(\cdot, \cdot) &: H^1(\Omega)^d \times L^2(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}, \\
 (v, q) &\mapsto - \int_{\Omega} q \nabla \cdot v \, dx, \\
 l^{n+1}(\cdot) &: H^1(\Omega)^d \rightarrow \mathbb{R}, \\
 v &\mapsto \int_{\Omega} E^{n+1} v \, dx.
 \end{aligned}$$

Pour simplifier les notations, on écrit $m^{n+1} = m$, $a^{n+1} = a$ et $l^{n+1} = l$.

Comme la vitesse vérifie des conditions de Dirichlet non homogènes sur Γ_D^u , on utilise un relèvement. La nouvelle inconnue, définie par $\bar{u}^{n+1} = u^{n+1} - u_D$, où $u_D \in U$, est nulle sur Γ_D^u et le problème s'écrit :

Trouver $\bar{u}^{n+1} \in X$ et $p^{n+1} \in Q$ tels que

$$\begin{aligned}
 \forall v \in X, \quad & \frac{m(\bar{u}^{n+1}, v)}{\Delta t} + a(\bar{u}^{n+1}, v) + b(v, p^{n+1}) = l(v) - a(u_D, v) + \frac{m(\bar{u}^n, v)}{\Delta t}, \\
 \forall q \in Q, \quad & b(\bar{u}^{n+1}, q) = -b(u_D, q).
 \end{aligned} \tag{III.47}$$

On introduit X_h et Q_h les espaces éléments finis approchant respectivement X et Q , obtenus à partir de la triangulation \mathcal{T}^h . On obtient de nouvelles applications bilinéaires et linéaires qui dépendent de h et qui sont encore notées dans la suite a , m , b et l . En écrivant

$$e(v_h) = l(v_h) - a(u_{Dh}, v_h) \text{ et } g(q_h) = -b(u_{Dh}, q_h),$$

le problème discret est le suivant :

Trouver $\bar{u}_h^{n+1} \in X_h$ et $p_h^{n+1} \in Q_h$ tels que

$$\forall v_h \in X_h, \quad \frac{m(\bar{u}_h^{n+1}, v_h)}{\Delta t} + a(\bar{u}_h^{n+1}, v_h) + b(v_h, p_h^{n+1}) = e(v_h) + \frac{m(\bar{u}_h^n, v_h)}{\Delta t}, \tag{III.48}$$

$$\forall q_h \in Q_h, \quad b(\bar{u}_h^{n+1}, q_h) = g(q_h). \tag{III.49}$$

Notons que la vitesse d'advection u_h^n dans les équations (III.21) et (III.48) vérifie les conditions de Dirichlet non homogènes sur Γ_D^u et appartient à l'espace $U_h = u_{Dh} + X_h$. Dans le paragraphe III.2.2.d, nous utiliserons l'équation (III.49) écrite sous la forme

$$\forall q_h \in Q_h, \quad b(u_h^{n+1}, q_h) = 0, \text{ avec } u_h^{n+1} \in U_h. \tag{III.50}$$

Afin d'assurer la convergence de la solution discrète vers la solution continue, nous prenons des espaces d'approximation pour la vitesse et la pression qui vérifient la condition inf-sup discrète [20, 39, 48]. Le choix des éléments fera l'objet du paragraphe III.2.2.d.

Ecrivons maintenant le problème (III.48)-(III.49) sous forme matricielle. On définit les bases éléments finis de X_h et Q_h par

$$X_h = \text{vect}\{\varphi_I \mid 0 \leq I \leq N^v\}, \quad Q_h = \text{vect}\{\pi_I \mid 0 \leq I \leq N^p\}.$$

Soient $\bar{\mathbf{U}}^{n+1}$ le vecteur représentant le champ \bar{u}_h^{n+1} dans la base de X_h et \mathbf{P}^{n+1} celui représentant p_h^{n+1} dans la base de Q_h . Finalement, le problème matriciel s'écrit

$$\begin{pmatrix} \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathbf{A}(\mathbf{U}^n) & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{U}}^{n+1} \\ \mathbf{P}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{E} + \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \bar{\mathbf{U}}^n \\ \mathbf{G} \end{pmatrix} \quad (\text{III.51})$$

où

$$\begin{aligned} [\mathbf{E}]_I &= e(\varphi_I) && \text{pour } I \in \{1 \dots N^v\}, \\ [\mathbf{G}]_I &= g(\pi_I) && \text{pour } I \in \{1 \dots N^p\}, \\ [\mathbf{M}]_{IJ} &= m(\varphi_J, \varphi_I) && \text{pour } I \in \{1 \dots N^v\}, J \in \{1 \dots N^v\}, \\ [\mathbf{A}]_{IJ} &= a(\varphi_J, \varphi_I) && \text{pour } I \in \{1 \dots N^v\}, J \in \{1 \dots N^v\}, \\ [\mathbf{B}]_{IJ} &= b(\varphi_J, \pi_I) && \text{pour } I \in \{1 \dots N^p\}, J \in \{1 \dots N^v\}. \end{aligned}$$

III.2.2.c Equation du bilan d'énergie

Soient \mathcal{T}_D et \mathcal{T} des sous-espaces de $H^1(\Omega)$ définis respectivement par

$$\mathcal{T}_D = \{\tau \in H^1(\Omega) \mid \tau = T_D \text{ sur } \Gamma_D^T\} \quad \text{et} \quad \mathcal{T} = \{\tau \in H^1(\Omega) \mid \tau = 0 \text{ sur } \Gamma_D^T\}.$$

En utilisant les conditions au bord (III.13)-(III.14), la formulation variationnelle associée au problème (III.44) est :

Trouver $T^{n+1} \in \mathcal{T}_D$ tel que $\forall \tau \in \mathcal{T}$

$$\int_{\Omega} \varrho^{n+1} c_p^{n+1} \left(\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + u^{n+1} \cdot \nabla T^{n+1} \right) \tau \, dx = - \int_{\Omega} \lambda^{n+1} \nabla T^{n+1} \cdot \nabla \tau \, dx.$$

Comme précédemment, on utilise un relèvement $\bar{T}^{n+1} = T^{n+1} - T_D$ avec $T_D \in \mathcal{T}_D$. On introduit ensuite \mathcal{T}_h l'espace éléments finis approchant \mathcal{T} à partir de la triangulation \mathcal{T}^h et le problème discret s'écrit :

Trouver $\bar{T}_h^{n+1} \in \mathcal{T}_h$ tel que $\forall \tau_h \in \mathcal{T}_h$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \varrho^{n+1} c_p^{n+1} \left(\frac{\bar{T}_h^{n+1} - \bar{T}_h^n}{\Delta t} + u_h^{n+1} \cdot \nabla \bar{T}_h^{n+1} \right) \tau_h \, dx &= - \int_{\Omega} \lambda^{n+1} \nabla \bar{T}_h^{n+1} \cdot \nabla \tau_h \, dx \\ &\quad - \int_{\Omega} \varrho^{n+1} c_p^{n+1} u_h^{n+1} \cdot \nabla T_{Dh} \tau_h \, dx - \int_{\Omega} \lambda^{n+1} \nabla T_{Dh} \cdot \nabla \tau_h \, dx. \end{aligned} \quad (\text{III.52})$$

On définit la base éléments finis de $\mathcal{T}_h = \text{vect}\{\tau_I \mid 0 \leq I \leq N^T\}$ et $\bar{T}_h^{n+1} = \sum_{I=1}^{N^T} \bar{\mathbf{T}}_I^{n+1} \tau_I$. On

obtient un système linéaire défini par :

Trouver $\bar{T}_h^{n+1} \in \mathcal{T}_h$ tel que $\forall 0 \leq I \leq N^T$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \varrho^{n+1} c_p^{n+1} \left(\frac{\bar{T}_h^{n+1} - \bar{T}_h^n}{\Delta t} + u_h^{n+1} \cdot \nabla \bar{T}_h^{n+1} \right) \tau_I \, dx &= - \int_{\Omega} \lambda^{n+1} \nabla \bar{T}_h^{n+1} \cdot \nabla \tau_I \, dx \\ &\quad - \int_{\Omega} \varrho^{n+1} c_p^{n+1} u_h^{n+1} \cdot \nabla T_{Dh} \tau_I \, dx + \int_{\Omega} \lambda^{n+1} \nabla T_{Dh} \cdot \nabla \tau_I \, dx. \end{aligned}$$

III.2.2.d Choix des éléments

Dans ce paragraphe, nous allons discuter du choix de la discrétisation à prendre pour les différents champs inconnus $(c_1, c_2, \mu_1, \mu_2, u, p, T)$.

Nous avons déjà vu dans le paragraphe III.2.2.b que nous voulons que les discrétisations pour la vitesse et la pression vérifient la condition inf-sup. C'est le cas par exemple, si on prend l'élément \mathbb{P}_2 pour l'approximation de la vitesse et \mathbb{P}_1 pour celle de la pression [39].

La méthode des éléments finis pour l'approximation des équations de Cahn-Hilliard a été étudiée notamment dans [7, 10, 35, 43, 44, 65]. Les paramètres d'ordre et les potentiels chimiques sont généralement approchés par des fonctions affines par morceaux.

De plus, nous voulons que le problème discret vérifie des propriétés analogues à celles du problème continu, énoncées dans la proposition III.0.1. Tout d'abord, l'ajout du terme de transport dans les équations de Cahn-Hilliard ne pose pas de difficultés pour montrer que les équations (III.45)-(III.46) sont équivalentes à

$$\forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu, \forall \nu^c \in \mathcal{V}_h^c$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx + \int_{\Omega} u_h^n \cdot \nabla c_{ih}^{n+1} \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \text{ pour } i = 1, 2, 3 \\ \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx, \text{ pour } i = 1, 2, 3. \end{aligned}$$

On s'intéresse ensuite à la conservation du volume des phases en discret. On obtient alors une contrainte entre les discrétisations des paramètres d'ordre et de la pression. En effet, comme $1 \in \mathcal{V}_h^\mu$, on peut écrire

$$\int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} dx = - \int_{\Omega} u_h^n \cdot \nabla c_{ih}^{n+1} dx = \int_{\Omega} c_{ih}^{n+1} \nabla \cdot u_h^n dx - \int_{\Gamma} c_{ih}^{n+1} u_h^n \cdot n ds.$$

Si on suppose que $mes(\Gamma_\tau^u)$ et $u_D = 0$ (sinon il n'y a pas conservation du volume des phases), on obtient

$$\int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} dx = \int_{\Omega} c_{ih}^{n+1} \nabla \cdot u_h^n dx.$$

Si c_{ih}^{n+1} est dans le même espace discret que la pression alors d'après (III.50), l'intégrale du membre de droite est nulle et on a bien le volume des phases qui est conservé.

Nous donnons un exemple où nous observons la variation du volume des phases lorsque l'approximation pour les paramètres d'ordre et la pression ne sont pas les mêmes. On s'intéresse à la montée d'une bulle dans un liquide. Le domaine d'étude (en m) est $[-8.5 \cdot 10^{-3}; 8.5 \cdot 10^{-3}] \times [0; 3.4 \cdot 10^{-2}]$ (géométrie 2D cartésienne) et le rayon de la bulle vaut $r_b = 0.00425$ m. La vitesse et la pression sont approchées respectivement par les éléments \mathbb{P}_2 (40301 degrés de liberté) et \mathbb{P}_1 (10151 degrés de liberté). Nous comparons sur la figure III.5, les résultats obtenus lorsque les paramètres d'ordre et les potentiels chimiques sont approchés par des \mathbb{P}_1 (comme la pression), puis par des \mathbb{P}_2 (comme la vitesse). Dans les deux cas, la bulle est montée à la même vitesse et avec la même forme. Par contre, dans le deuxième cas, le volume de la bulle n'est pas conservé comme on pouvait s'y attendre d'après l'étude précédente. Dans le cas présent, cette diminution reste faible mais pourrait avoir une influence plus importante sur des temps de calcul plus longs.

On peut aussi écrire l'équation (III.21) sous forme conservative. Dans ce cas, on a bien le volume de chaque phase qui est conservé. En effet, on obtient

$$\int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx - \int_{\Omega} c_{ih}^{n+1} u_h^n \cdot \nabla \nu_h^\mu dx = - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_1} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \quad \forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu.$$

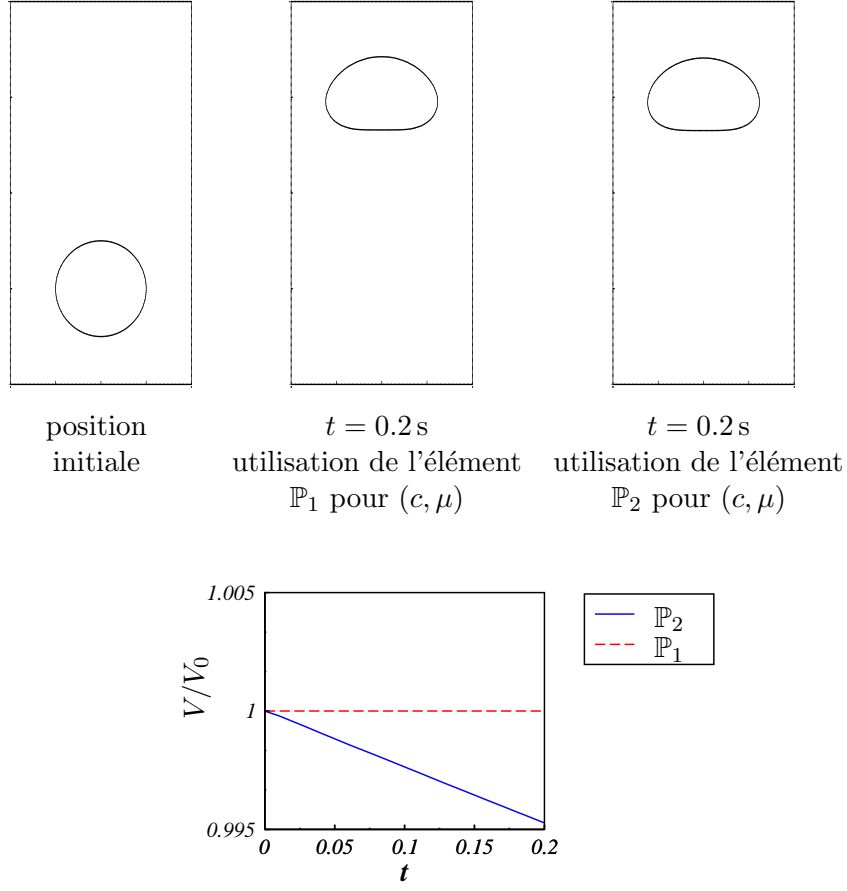


FIG. III.5 – Isovaleurs $c = 0.5$ pour les discrétisations \mathbb{P}_1 et \mathbb{P}_2 du paramètre d'ordre et évolution du volume V de la bulle en fonction du temps normalisé par le volume initial V_0

Il suffit de prendre $\nu_h^\mu = 1$ pour conclure.

Par contre, si le terme $\int_{\Omega} u_h^n \cdot \nabla \nu_h^\mu dx$ est non nul, le système discret définit pour $i = 1, 2$ par

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx - \int_{\Omega} c_{ih}^{n+1} u_h^n \cdot \nabla \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_1} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \quad \forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu, \\ \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx, \quad \forall \nu_h^c \in \mathcal{V}_h^c, \\ \text{et } c_{3h} &= 1 - c_{1h} - c_{2h}, \quad \mu_{3h} = - \left(\frac{\Sigma_3}{\Sigma_1} \mu_{1h} + \frac{\Sigma_3}{\Sigma_2} \mu_{2h} \right). \end{aligned} \quad (\text{III.53})$$

n'est pas équivalent au système de Cahn-Hilliard suivant avec $i = 1, 2, 3$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{n+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx - \int_{\Omega} c_{ih}^{n+1} u_h^n \cdot \nabla \nu_h^\mu dx &= - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_1} \nabla \mu_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \quad \forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h^\mu \\ \int_{\Omega} \mu_{ih}^{n+1} \nu_h^c dx &= \int_{\Omega} D_i(\mathbf{c}_h^{n+1}, \mathbf{c}_h^n) \nu_h^c dx + \int_{\Omega} \frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla c_{ih}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^c dx, \quad \forall \nu_h^c \in \mathcal{V}_h^c. \end{aligned} \quad (\text{III.54})$$

En effet, c_{3h} vérifie l'équation suivante

$$\int_{\Omega} \frac{c_{3h}^{n+1} - c_{3h}^n}{\Delta t} \nu_h^\mu dx - \int_{\Omega} c_{3h}^{n+1} u_h^n \cdot \nabla \nu_h^\mu dx + \int_{\Omega} u_h^n \cdot \nabla \nu_h^\mu dx = - \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_1} \nabla \mu_{3h}^{n+1} \cdot \nabla \nu_h^\mu dx, \quad \forall \nu_h^\mu \in \mathcal{V}_h.$$

Si les potentiels chimiques sont dans le même espace d'approximation que la pression et si $mes(\Gamma_\tau^u)$ et $u_D = 0$ alors

$$\int_{\Omega} u_h^n \cdot \nabla \nu_h^\mu dx = 0$$

et on a bien l'équivalence des systèmes.

Pour illustrer ce comportement, on s'intéresse au passage d'une bulle à travers une interface. Le domaine d'étude (en m) est $[-8.5 \cdot 10^{-3}; 8.5 \cdot 10^{-3}] \times [0; 3.4 \cdot 10^{-2}]$ (géométrie 2D cartésienne) et le rayon de la bulle vaut $r_b = 0.00425$ m. La bulle est représentée par c_1 et la phase lourde par c_2 . On résout les équations de Cahn-Hilliard sous forme conservative. La vitesse et la pression sont approchées respectivement par les éléments \mathbb{P}_2 (14581 degrés de liberté) et \mathbb{P}_1 (3691 degrés de liberté). Nous comparons les résultats obtenus lorsque les paramètres d'ordre et les potentiels chimiques sont approchés par des \mathbb{P}_1 (comme la pression), puis par des \mathbb{P}_2 (comme la vitesse). On visualise sur la figure III.6 une coupe des paramètres d'ordre. On remarque que lorsque les potentiels chimiques ne sont pas dans le même espace d'approximation que la pression, le paramètre c_3 prend des valeurs négatives dans la bulle alors qu'il reste bien à 0 lorsqu'on utilise le même élément.

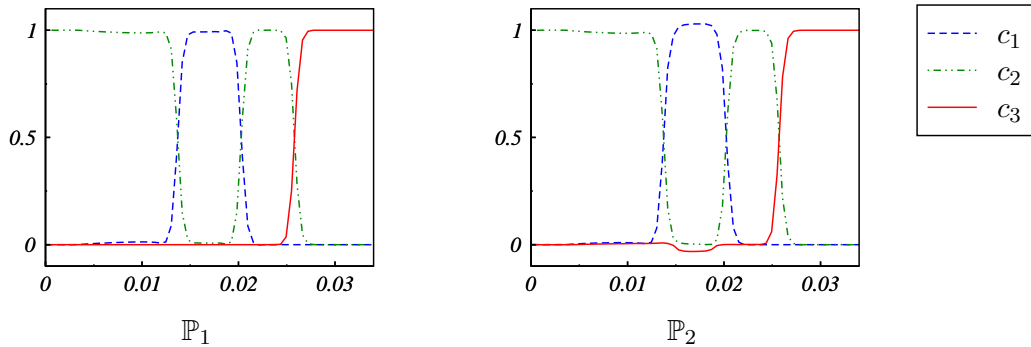


FIG. III.6 – Vue en coupe des paramètres d'ordre pour les discrétisations \mathbb{P}_1 et \mathbb{P}_2 du potentiel chimique à $t = 0.1$ s, en $x = 0$

Finalement, on veut choisir des espaces d'approximation qui vérifient la condition inf-sup discrète et utiliser le même élément pour approcher la pression et les paramètres d'ordre. Il n'est donc pas nécessaire d'avoir de l'ordre 2 pour la discrétisation en espace pour le champ de vitesse puisqu'on ne peut pas augmenter l'ordre d'approximation pour les inconnues c_i . Ainsi nous avons pris, dans nos applications numériques, l'élément \mathbb{P}_1 -bulle² pour la vitesse et \mathbb{P}_1 pour la pression ainsi que pour les paramètres d'ordre. Ce couple d'éléments vérifie la condition inf-sup discrète [39]. Enfin, il est moins coûteux de choisir l'élément \mathbb{P}_1 pour l'approximation des potentiels chimiques et de la température.

²appelé aussi \mathbb{P}_1+ . Un degré de liberté est ajouté dans chaque maille.

III.3 Résolution numérique du problème discret

Nous décrivons dans cette section les résolutions numériques des problèmes de Cahn-Hilliard et de Navier-Stokes à chaque pas de temps. Pour simplifier les notations, l'exposant $n + 1$ est omis.

La résolution de l'équation du bilan d'énergie n'est pas détaillée car elle ne présente pas de difficultés importantes.

III.3.1 Equations de Cahn-Hilliard

Le problème (III.45) peut être résolu par une méthode de Newton-Raphson. L'algorithme est le suivant

étape 0 : initialisation avec $(\mathbf{C}_1^{(0)}, \mathbf{M}_1^{(0)}, \mathbf{C}_2^{(0)}, \mathbf{M}_2^{(0)}) = (\mathbf{C}_1^n, \mathbf{M}_1^n, \mathbf{C}_2^n, \mathbf{M}_2^n)$

étape $k + 1$: $(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)})$ donnés par l'étape k .
Calculer $(\mathbf{C}_1^{(k+1)}, \mathbf{M}_1^{(k+1)}, \mathbf{C}_2^{(k+1)}, \mathbf{M}_2^{(k+1)})$ solution de

$$\begin{pmatrix} \mathbf{J}^{c_1 c_1} & \mathbf{J}^{c_1 \mu_1} & \mathbf{J}^{c_1 c_2} & 0 \\ \mathbf{J}^{\mu_1 c_1} & \mathbf{J}^{\mu_1 \mu_1} & 0 & 0 \\ \mathbf{J}^{c_2 c_1} & 0 & \mathbf{J}^{c_2 c_2} & \mathbf{J}^{c_2 \mu_2} \\ 0 & 0 & \mathbf{J}^{\mu_2 c_2} & \mathbf{J}^{\mu_2 \mu_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(k+1)} - \mathbf{C}_1^{(k)} \\ \mathbf{M}_1^{(k+1)} - \mathbf{M}_1^{(k)} \\ \mathbf{C}_2^{(k+1)} - \mathbf{C}_2^{(k)} \\ \mathbf{M}_2^{(k+1)} - \mathbf{M}_2^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathcal{R}^{c_1}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \\ -\mathcal{R}^{\mu_1}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \\ -\mathcal{R}^{c_2}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \\ -\mathcal{R}^{\mu_2}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \end{pmatrix} \quad (\text{III.55})$$

La solution recherchée est posée égale à $(\mathbf{C}_1^{(\kappa)}, \mathbf{M}_1^{(\kappa)}, \mathbf{C}_2^{(\kappa)}, \mathbf{M}_2^{(\kappa)})$ où κ est la première valeur de k telle que le critère de convergence suivant est vérifié

$$\left| \mathcal{R}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \right|_2 < \epsilon,$$

où \mathcal{R} est défini par

$$\mathcal{R}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) = \begin{pmatrix} -\mathcal{R}^{c_1}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \\ -\mathcal{R}^{\mu_1}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \\ -\mathcal{R}^{c_2}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \\ -\mathcal{R}^{\mu_2}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \end{pmatrix}$$

Les blocs de la matrice \mathbf{J} sont définis, pour $i, j \in \{1, 2\}$ $j \neq i$, par

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^{c_i c_i}]_{IJ} &= \left[\frac{\partial \mathcal{R}^{c_i}}{\partial \mathbf{C}_i}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \right]_{IJ} \quad 1 \leq I \leq N^c \text{ et } 1 \leq J \leq N^c \\ &= \frac{\partial \mathcal{R}_I^{c_i}}{\partial (\mathbf{C}_i)_J}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) = \int_{\Omega} -\frac{3}{4} \Sigma_i \varepsilon \nabla \nu_J^c \cdot \nabla \nu_I^c dx - \int_{\Omega} \frac{\partial D_i}{\partial c_i}(\mathbf{c}_h^{(k)}, \mathbf{c}_h^n) \nu_J^c \nu_I^c dx, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{J}^{c_i c_j}]_{IJ} &= \left[\frac{\partial \mathcal{R}^{c_i}}{\partial \mathbf{C}_j}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \right]_{IJ} \quad 1 \leq I \leq N^c \text{ et } 1 \leq J \leq N^c \\
 &= \frac{\partial \mathcal{R}_I^{c_i}}{\partial (\mathbf{C}_j)_J}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) = \int_{\Omega} -\frac{\partial D_i}{\partial c_j}(\mathbf{c}_h^{(k)}, \mathbf{c}_h^n) \nu_J^c \nu_I^c dx, \\
 [\mathbf{J}^{c_i \mu_i}]_{IJ} &= \left[\frac{\partial \mathcal{R}^{c_i}}{\partial \mathbf{M}_i}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \right]_{IJ} \quad 1 \leq I \leq N^c \text{ et } 1 \leq J \leq N^\mu \\
 &= \frac{\partial \mathcal{R}_I^{c_i}}{\partial (\mathbf{M}_i)_J}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) = \int_{\Omega} \nu_J^\mu \nu_I^c dx, \\
 [\mathbf{J}^{\mu_i c_i}]_{IJ} &= \left[\frac{\partial \mathcal{R}^{\mu_i}}{\partial \mathbf{C}_i}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \right]_{IJ} \quad 1 \leq I \leq N^\mu \text{ et } 1 \leq J \leq N^c \\
 &= \frac{\partial \mathcal{R}_I^{\mu_i}}{\partial (\mathbf{C}_i)_J}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) = \int_{\Omega} \frac{1}{\Delta t} \nu_J^c \nu_I^\mu dx + \int_{\Omega} u_h^n \cdot \nabla \nu_J^c \nu_I^\mu dx, \\
 [\mathbf{J}^{\mu_i \mu_i}]_{IJ} &= \left[\frac{\partial \mathcal{R}^{\mu_i}}{\partial \mathbf{M}_i}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) \right]_{IJ} \quad 1 \leq I \leq N^\mu \text{ et } 1 \leq J \leq N^\mu \\
 &= \frac{\partial \mathcal{R}_I^{\mu_i}}{\partial (\mathbf{M}_i)_J}(\mathbf{C}_1^{(k)}, \mathbf{C}_2^{(k)}, \mathbf{M}_1^{(k)}, \mathbf{M}_2^{(k)}) = \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \nu_J^\mu \cdot \nabla \nu_I^\mu dx,
 \end{aligned}$$

avec $M_{0h}^\ell = M_0(\mathbf{c}_h^n)$ ou $M_0(\mathbf{c}_h^{(k)})$.

Si la mobilité est constante ou si elle est prise au temps t^n alors le calcul de la matrice jacobienne ci-dessus est exact. Par contre, si la mobilité est discrétisée de manière implicite, on calcule une matrice jacobienne partielle puisqu'on ne dérive pas les termes contenant la mobilité par rapport aux paramètres d'ordre (termes qui interviendraient dans $\mathbf{J}^{\mu_i c_i}$ et $\mathbf{J}^{\mu_i c_j}$) et la valeur de la mobilité dans $\mathbf{J}^{\mu_i \mu_i}$ est réactualisée à chaque itération de l'algorithme de Newton.

Certains termes de la matrice jacobienne ne changent d'une itération à l'autre dans l'algorithme de Newton. Afin de diminuer le temps calcul, seuls les termes $\mathbf{J}^{c_i c_i}$ et $\mathbf{J}^{c_i c_j}$ sont réassemblés à chaque itération de l'algorithme ainsi que $\mathbf{J}^{\mu_i \mu_i}$ si la mobilité est implicite ($M_{0h}^\ell = M_0(\mathbf{c}_h^{(k)})$).

Pour la résolution du système (III.55), nous utilisons le solveur direct proposé par la librairie UMFPACK [30], basé sur une factorisation LU.

On vérifie maintenant que le volume des phases est conservé à chaque itération de ce solveur. En effet, en notant que $c_{ih}^k = \overline{c_{ih}}^k + c_{iDh}$ on, a pour $i = 1, 2$

$$\int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{k+1} - c_{ih}^n}{\Delta t} \nu_I^\mu dx + \int_{\Omega} u_h^n \cdot \nabla c_{ih}^{k+1} \nu_I^\mu dx + \int_{\Omega} \frac{M_{0h}^\ell}{\Sigma_i} \nabla \mu_{ih}^{k+1} \cdot \nabla \nu_I^\mu dx = 0, \quad \forall I = 1, \dots, N^\mu$$

Comme $1 \in \mathcal{V}_h^\mu$, il est clair que si $mes(\Gamma_\tau^u)$, $u_D = 0$ et si les paramètres d'ordre sont dans le même espace d'approximation que la pression, on a

$$\int_{\Omega} \frac{c_{ih}^{k+1} - c_{ih}^k}{\Delta t} dx = 0.$$

III.3.2 Equations de Navier-Stokes

Dans cette partie, nous présentons différentes méthodes pour résoudre le problème (III.51) écrit sous la forme

$$\begin{cases} \mathbf{M} \left(\frac{\bar{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{U}}^n}{\Delta t} \right) + \mathbf{A}(\mathbf{U}^n) \bar{\mathbf{U}} + \mathbf{B}^t \mathbf{P} = \mathbf{E}, \\ \mathbf{B} \bar{\mathbf{U}} = \mathbf{G}. \end{cases} \quad (\text{III.56})$$

Tout d'abord, nous décrivons des méthodes connues comme la méthode du Lagrangien augmenté [45] et la méthode de projection incrémentale [54]. La première, qui est une méthode itérative, est plus précise mais plus coûteuse en temps calcul que la seconde où seulement trois équations sont résolues. Enfin, nous proposons une méthode de pénalité-projection qui est plus précise que la méthode de projection incrémentale et moins coûteuse en temps calcul que la méthode du Lagrangien augmenté (voir [64] pour plus de détails sur cette méthode, ainsi que pour des comparaisons entre les différents algorithmes). Nous comparerons numériquement l'impact des différentes méthodes sur la conservation du volume des phases et sur les vitesses de montée d'une bulle dans un liquide dans le paragraphe III.3.2.d.

III.3.2.a Méthode du Lagrangien augmenté

Dans l'algorithme d'Uzawa avec Lagrangien augmenté, on effectue une boucle interne dans chaque pas de temps, jusqu'à avoir la contrainte

$$\mathbf{B} \bar{\mathbf{U}} = \mathbf{G} \quad (\text{III.57})$$

vérifiée. L'algorithme est le suivant

étape 0 : initialisation avec $(\bar{\mathbf{U}}^{(0)}, \mathbf{P}^{(0)}) = (\bar{\mathbf{U}}^n, \mathbf{P}^n)$

étape $k + 1$: $(\bar{\mathbf{U}}^{(k)}, \mathbf{P}^{(k)})$ donnés par l'étape k .
Calculer $(\bar{\mathbf{U}}^{(k+1)}, \mathbf{P}^{(k+1)})$ solution de

$$\begin{aligned} \mathbf{M} \left(\frac{\bar{\mathbf{U}}^{(k+1)} - \bar{\mathbf{U}}^n}{\Delta t} \right) + \mathbf{A}(\mathbf{U}^n) \bar{\mathbf{U}}^{(k+1)} + \mathbf{B}^T \mathbf{P}^{(k)} + r \mathbf{B}^T \mathbf{M}_{\mathbf{P}}^{-1} (\mathbf{B} \bar{\mathbf{U}}^{(k+1)} - \mathbf{G}) &= \mathbf{E}, \\ \mathbf{P}^{(k+1)} &= \mathbf{P}^{(k)} + \rho (\mathbf{B} \bar{\mathbf{U}}^{(k+1)} - \mathbf{G}). \end{aligned}$$

On pose alors

$$\bar{\mathbf{U}} = \bar{\mathbf{U}}^{(\kappa+1)} \quad \mathbf{P} = \mathbf{P}^{(\kappa+1)}$$

où κ est la première valeur de k satisfaisant le critère de convergence suivant

$$\left| \mathbf{B} \bar{\mathbf{U}}^{(k+1)} - \mathbf{G} \right| < \epsilon.$$

La matrice $\mathbf{M}_{\mathbf{P}}$ apparaissant dans cet algorithme est la matrice masse de pression définie par

$$[\mathbf{M}_{\mathbf{P}}]_{IJ} = \int_{\Omega} \pi_I \pi_J \, dx \text{ pour } I, J \in \{1, \dots, N^p\}.$$

Pour simplifier le calcul de $\mathbf{M}_{\mathbf{P}}^{-1}$, on approche la matrice $\mathbf{M}_{\mathbf{P}}$ par la matrice "lumpée", $\mathbf{M}_{\mathbf{P}\ell}$ définie par

$$[\mathbf{M}_{\mathbf{P}\ell}]_{IJ} = \left(\sum_{0 \leq K \leq N^p} [\mathbf{M}_{\mathbf{P}}]_{IK} \right) \delta_{IJ} \text{ pour } 0 \leq I, J \leq N^p.$$

Nous utilisons comme précédemment le solveur direct proposé par UMFPACK [30] pour résoudre le système. La factorisation de la matrice est faite seulement à la première itération de l'algorithme d'Uzawa.

Un critère suffisant de convergence est $0 < \rho < 2r$ [45]. Nous prendrons $r = \rho$ et l'algorithme est noté AL dans la suite.

III.3.2.b Méthode de projection incrémentale

La méthode de projection incrémentale se décompose en trois étapes [54].

On calcule tout d'abord une prédiction de vitesse, notée $\tilde{\mathbf{U}}$, qui ne vérifie pas la contrainte (III.57) d'incompressibilité. Ensuite, en utilisant $\tilde{\mathbf{U}}$, on résout l'équation vérifiée par l'incrément de pression $\Phi = \mathbf{P} - \mathbf{P}^n$. Puis, on corrige la vitesse pour avoir la contrainte (III.57) satisfaite. Précisément, l'algorithme s'écrit

étape 1 : prédiction de vitesse, calcul de $\tilde{\mathbf{U}}$

$$\mathbf{M} \left(\frac{\tilde{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{U}}^n}{\Delta t} \right) + \mathbf{A}(\mathbf{U}^n) \tilde{\mathbf{U}} + \mathbf{B}^T \mathbf{P}^n = \mathbf{E}, \quad (\text{III.58})$$

étape 2 : calcul de $\Phi = \mathbf{P} - \mathbf{P}^n$ via l'équation

$$\Delta t \mathbf{B} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{B}^T \Phi = \mathbf{B} \tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{G}, \quad (\text{III.59})$$

étape 3 : calcul de la vitesse $\bar{\mathbf{U}}$

$$\mathbf{M} \left(\frac{\bar{\mathbf{U}} - \tilde{\mathbf{U}}}{\Delta t} \right) + \mathbf{B}^T \Phi = 0. \quad (\text{III.60})$$

On remarque qu'aucune itération interne n'est effectuée et que l'approximation $(\bar{\mathbf{U}}, \mathbf{P})$ obtenue n'est pas la solution du problème couplé (III.56). Cette méthode est donc moins précise que la méthode du Lagrangien augmenté, car elle introduit une erreur supplémentaire dite de fractionnement.

La difficulté de la résolution de l'équation (III.59) est l'inversion des matrices \mathbf{M} et $\mathbf{B} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{B}^T$. Afin d'éviter le calcul de \mathbf{M}^{-1} , deux stratégies ont été envisagées. La première est d'approcher la matrice masse de la vitesse par la matrice lumpée, notée \mathbf{M}_l . On remplace alors dans les équations (III.58)-(III.60) \mathbf{M} par \mathbf{M}_l . Le nouvel algorithme sera noté $\text{IP}_{\mathbf{M}_l}$ dans la suite.

Par contre, cette approche ne peut pas être utilisée dans tous les cas car pour certaines approximations de la vitesse, par exemple pour l'élément \mathbb{P}_2 , la somme des termes des lignes dans la matrice masse est nulle. Dans ces cas, on approche la matrice $\mathbf{B} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{B}^T$ par \mathbf{L} l'opérateur discret associé à un problème de Poisson avec des conditions de Dirichlet homogènes sur Γ_τ^u et des conditions de Neumann homogènes sur $\Gamma_D^u \cup \Gamma_t^u$. Pour éviter des difficultés pratiques dans la mise en œuvre du processus d'assemblage (par exemple l'élimination dans le système linéaire des degrés de liberté de $\phi_h = p_h - p_h^n$ associés à des nœuds de pression situés sur Γ_τ^u conduirait à des vecteurs de tailles différentes pour Φ et \mathbf{P}), les conditions de Dirichlet au bord sont imposées par pénalisation [53, 64]. La matrice \mathbf{L} est alors définie par

$$[\mathbf{L}]_{IJ} = \int_{\Omega} \frac{1}{\varrho} \nabla \pi_I \cdot \nabla \pi_J dx + \int_{\Gamma_\tau^u} \alpha \pi_I \pi_J ds, \quad 0 \leq I, J \leq N^p,$$

où α est un coefficient de pénalisation (en pratique nous prenons $\alpha = 10^8$).

Finalement l'algorithme, noté $\text{IP}_{\mathbf{L}}$, est le suivant

étape 1 : prédiction de vitesse

$$\mathbf{M} \left(\frac{\tilde{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{U}}^n}{\Delta t} \right) + \mathbf{A}(\mathbf{U}^n) \tilde{\mathbf{U}} + \mathbf{B}^T \mathbf{P}^n = \mathbf{E},$$

étape 2 : calcul de $\Phi = \mathbf{P} - \mathbf{P}^n$ via l'équation

$$\Delta t \mathbf{L} \Phi = \mathbf{B} \tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{G},$$

étape 3 : calcul de la vitesse $\bar{\mathbf{U}}$

$$\mathbf{M} \left(\frac{\bar{\mathbf{U}} - \tilde{\mathbf{U}}}{\Delta t} \right) + \mathbf{B}^T \Phi = 0.$$

Comme on approche la matrice $\mathbf{B} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{B}^T$ par \mathbf{L} , la contrainte (III.57) n'est plus vérifiée. Nous montrerons sur un exemple numérique dans le paragraphe III.3.2.d, que dans ce cas le volume des phases n'est pas conservé.

Dans la première et la troisième étape de l'algorithme, les systèmes sont résolus par le solveur direct d'UMFPACK [30]. Pour le calcul de Φ , nous utilisons une méthode de Gradient Conjugué avec un préconditionnement de Jacobi. L'utilisation pour cette étape d'un solveur direct n'est pas possible lorsque la vitesse vérifie des conditions de Dirichlet sur tous les bords car la pression n'est définie qu'à une constante près.

III.3.2.c Méthode de pénalité-projection

L'idée pour cette variante de méthode de projection [64], est d'introduire le terme d'augmentation $r \mathbf{B}^T \mathbf{M}_{\mathbf{p}\ell}^{-1} (\mathbf{B} \tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{G})$ de l'algorithme d'Uzawa AL dans l'étape de prédiction de la vitesse. La première étape devient alors

$$\mathbf{M} \left(\frac{\tilde{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{U}}^n}{\Delta t} \right) + \mathbf{A}(\mathbf{U}^n) \tilde{\mathbf{U}} + \mathbf{B}^T \mathbf{P}^n + r \mathbf{B}^T \mathbf{M}_{\mathbf{p}\ell}^{-1} (\mathbf{B} \tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{G}) = \mathbf{E} \quad (\text{III.61})$$

Le calcul de la pression est alors modifié. Le système (III.59)-(III.60) est équivalent à

$$\begin{cases} \mathbf{M} \left(\frac{\bar{\mathbf{U}} - \tilde{\mathbf{U}}}{\Delta t} \right) + \mathbf{B}^T \Phi = 0, \\ \mathbf{B} \bar{\mathbf{U}} = \mathbf{G}. \end{cases} \quad (\text{III.62})$$

Si on somme (III.61) et la première équation du système (III.62) on obtient

$$\mathbf{M} \left(\frac{\bar{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{U}}^n}{\Delta t} \right) + \mathbf{A}(\mathbf{U}^n) \tilde{\mathbf{U}} + \mathbf{B}^T \left(\mathbf{P}^n + r \mathbf{M}_{\mathbf{p}\ell}^{-1} (\mathbf{B} \tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{G}) + \Phi \right) = \mathbf{E}.$$

Pour retrouver le système (III.56) à l'approximation près de $\mathbf{A}(\mathbf{U}^n) \bar{\mathbf{U}}$ par $\mathbf{A}(\mathbf{U}^n) \tilde{\mathbf{U}}$, on doit poser

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^n + r \mathbf{M}_{\mathbf{p}\ell}^{-1} (\mathbf{B} \tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{G}) + \Phi.$$

Ainsi, la méthode de pénalité-projection s'écrit

étape 1 : prédiction de vitesse

$$\mathbf{M} \left(\frac{\tilde{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{U}}^n}{\Delta t} \right) + \mathbf{A}(\mathbf{U}^n) \tilde{\mathbf{U}} + \mathbf{B}^T \mathbf{P}^n + r \mathbf{B}^T \mathbf{M}_{\mathbf{p}\ell}^{-1} (\mathbf{B} \tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{G}) = \mathbf{E},$$

étape 2 : calcul de $\Phi = \mathbf{P} - \mathbf{P}^n - r\mathbf{M}_{\text{pl}}^{-1}(\mathbf{B}\tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{G})$ via l'équation

$$\Delta t \mathbf{B} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{B}^T \Phi = \mathbf{B} \tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{G},$$

étape 3 : calcul de la vitesse $\bar{\mathbf{U}}$

$$\mathbf{M} \left(\frac{\bar{\mathbf{U}} - \tilde{\mathbf{U}}}{\Delta t} \right) + \mathbf{B}^T \Phi = 0.$$

Comme pour la méthode de projection incrémentale, pour l'étape 2, on peut soit approcher la matrice \mathbf{M} par une matrice diagonale, on notera alors l'algorithme $\text{PP}_{\mathbf{M}_i}$, soit approcher la matrice $\mathbf{B} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{B}^T$ par la matrice \mathbf{L} et on appellera cet algorithme $\text{PP}_{\mathbf{L}}$.

Cette méthode introduit une erreur de fractionnement par rapport à la méthode du Lagrangien augmenté. Le terme d'augmentation de l'étape de prédiction permet d'assurer une prise en compte partielle de la contrainte d'incompressibilité dès l'étape de prédiction de vitesse.

Les solveurs que nous utilisons pour cet algorithme sont les mêmes que ceux du paragraphe précédent.

III.3.2.d Comparaison des méthodes de résolution

On s'intéresse à la montée d'une bulle sphérique. Le domaine d'étude est $[0; 4 \cdot 10^{-3}] \times [0; 8 \cdot 10^{-3}]$ (géométrie 2D cartésienne) et le rayon de la bulle vaut $r_b = 7.9 \cdot 10^{-4}$ m. Sur les figures III.7 et III.8, on compare les résultats obtenus pour les différentes méthodes présentées précédemment. La méthode AL étant la plus précise, le calcul obtenu avec cette méthode sert de référence.

Sur la figure III.7, on remarque que la bulle a la même forme pour les différentes méthodes. Par contre, pour les méthodes de projection incrémentale $\text{IP}_{\mathbf{L}}$ et $\text{IP}_{\mathbf{M}_i}$, la vitesse de montée de bulle est beaucoup plus faible que pour les autres méthodes. Le terme d'augmentation dans l'étape de prédiction pour les méthodes de pénalité-projection réduit sensiblement l'erreur de fractionnement.

On s'intéresse maintenant à la conservation du volume de la bulle. Nous avons vu dans le paragraphe III.2.2.d que pour conserver le volume des phases, on a besoin entre autre que $\mathbf{B}\bar{\mathbf{U}} = \mathbf{G}$. Ceci n'est pas vérifié lorsque la matrice $\mathbf{B} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{B}^T$ est approchée par \mathbf{L} . Sur la figure III.8, on observe que les méthodes $\text{PP}_{\mathbf{L}}$ et $\text{IP}_{\mathbf{L}}$ ne conservent pas le volume de la bulle. Lorsqu'on augmente le paramètre r , on remarque sur la figure III.8 (b) que la diminution du volume est réduite.

En conclusion, nous utiliserons dans la suite les méthodes de pénalité-projection avec r assez grand qui sont moins coûteuses en temps calcul que la méthode du Lagrangien augmenté et plus précises que les méthodes de projection incrémentale. Elles représentent donc un bon compromis.

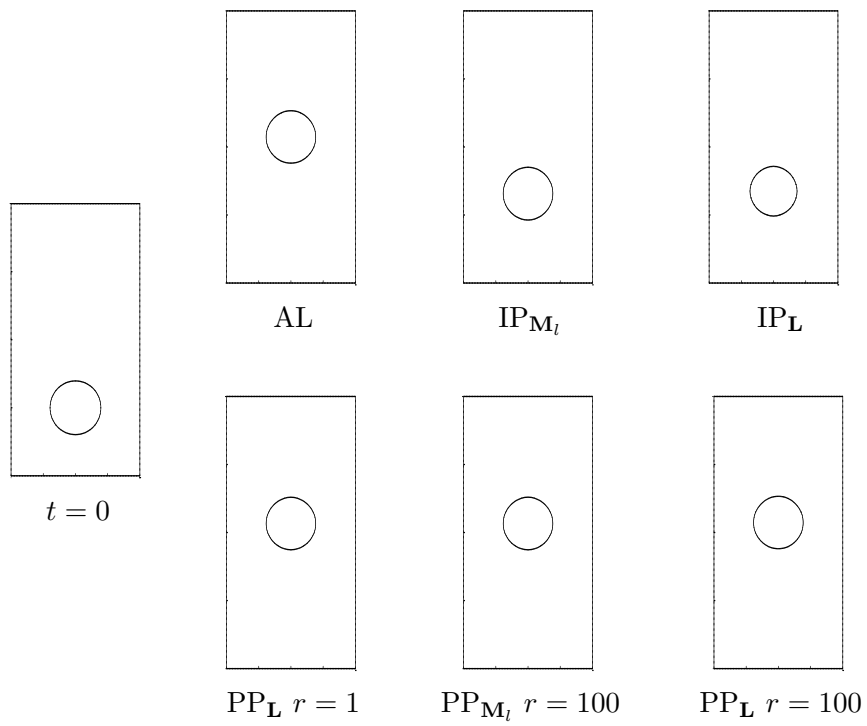
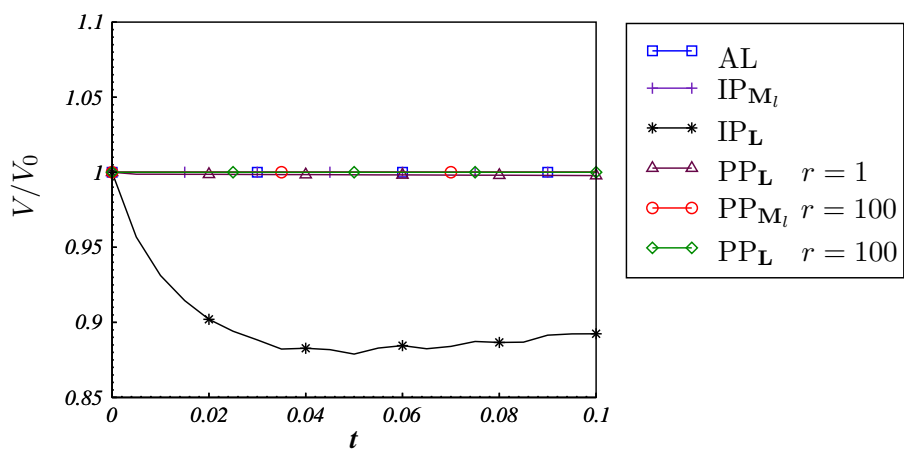
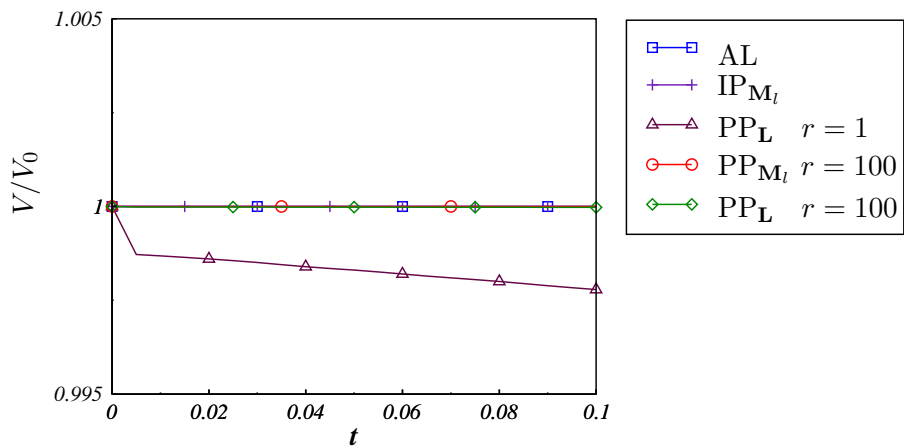


FIG. III.7 – Isovaleurs $c = 0.5$ pour les différentes méthodes de résolution à $t = 0.1$ s



(a)



(b)

 FIG. III.8 – Evolution en temps du volume V de la bulle normalisé par le volume initial V_0 pour les différentes méthodes de résolution donné à deux échelles différentes

III.4 Influence de quelques paramètres

Dans ce paragraphe, nous donnons des exemples de simulations numériques (montée d'une bulle dans un liquide, bulle piégée dans une interface liquide/liquide) afin de comprendre l'influence de quelques paramètres. On s'intéresse plus particulièrement à la régularisation des paramètres physiques, au coefficient de mobilité M_0 , à l'épaisseur de l'interface ε et au pas de maillage h .

III.4.1 Régularisation des paramètres physiques

Nous donnons quelques exemples de régularisation des paramètres physiques $(\varrho, \eta, c_p, \lambda)$. Par exemple, la régularisation de la masse volumique $\varrho(c)$ doit vérifier

$$\varrho(c) = \begin{cases} \varrho_1 & \text{si } c = 1, \\ \varrho_2 & \text{si } c = 0, \end{cases}$$

dans le cas diphasique où c décrit la phase 1.

Sur la figure III.9, on propose trois types de régularisation avec $0 \leq c \leq 1$

– la moyenne arithmétique

$$\varrho(c) = \varrho_1 c + \varrho_2 (1 - c),$$

– la moyenne harmonique

$$\frac{1}{\varrho(c)} = \frac{c}{\varrho_1} + \frac{1 - c}{\varrho_2},$$

– la fonction Heavyside régularisée

$$\varrho(c) = (\varrho_1 - \varrho_2)H_e(c - 0.5) + \varrho_2,$$

où

$$H_e(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -e \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{x}{e} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi x}{e}\right) \right) & \text{si } |x| < e, \\ 1 & \text{si } x > e. \end{cases}$$

On compare ces différentes formulations sur le problème d'une montée de bulle. On prend $e = 0.4$ dans l'exemple. Le domaine d'étude (en m) est $[0; 7.65 \cdot 10^{-2}] \times [0; 1.275 \cdot 10^{-2}]$ (géométrie 2D cartésienne) et le rayon de la bulle vaut $4.25 \cdot 10^{-3}$ m. Les masses volumiques sont $\varrho_1 = 1 \text{ kg.m}^{-3}$ pour la bulle et $\varrho_2 = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ pour le liquide. On utilise la fonction Heavyside régularisée pour la viscosité dans les trois cas.

On observe sur la figure III.9 que la moyenne harmonique favorise dans la zone interfaciale la quantité ϱ_1 pour cet exemple. D'ailleurs sur la figure III.10, la bulle monte plus vite que pour les deux autres régularisations puisque dans presque toute l'interface, la masse volumique vaut $\varrho_1 = 1 \text{ kg.m}^{-3}$.

La moyenne arithmétique et la fonction Heavyside régularisée donnent des résultats semblables. Cependant, il peut arriver que l'interface s'épaississe, par exemple dans la partie inférieure de la bulle à cause des mouvements convectifs (figure III.13 du §III.4.2). Dans ce cas, le paramètre d'ordre peut valoir 0.1 sur une zone où la masse volumique doit être égale à ϱ_2 . On voit sur la figure III.9 que dans ce cas, la moyenne arithmétique introduira une erreur par rapport à celle de la fonction Heavyside régularisée.

Par conséquent, nous avons utilisé la fonction Heavyside régularisée dans nos études, définie dans le cas triphasique par

$$\varrho(\mathbf{c}) = (\varrho_1 - \varrho_3)H_e(c_1 - 0.5) + (\varrho_2 - \varrho_3)H_e(c_2 - 0.5) + \varrho_3,$$

avec $e = 0.4$. Cette régularisation est utilisée aussi pour la viscosité η , la chaleur massique c_p et la conductivité thermique λ .

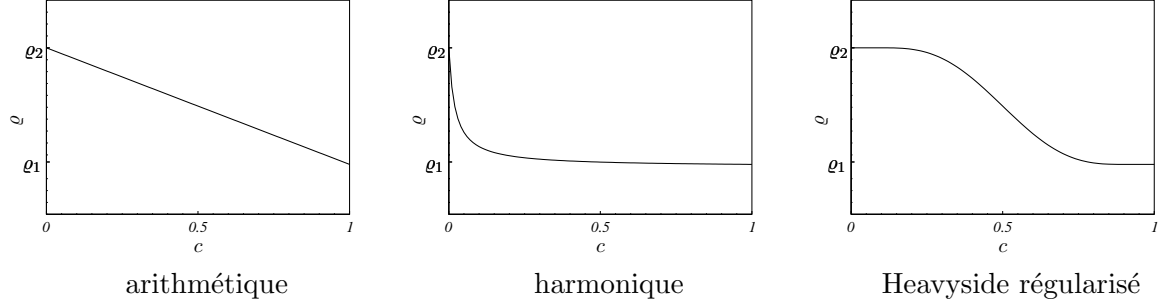


FIG. III.9 – Régularisation de la masse volumique en fonction du paramètre d'ordre c

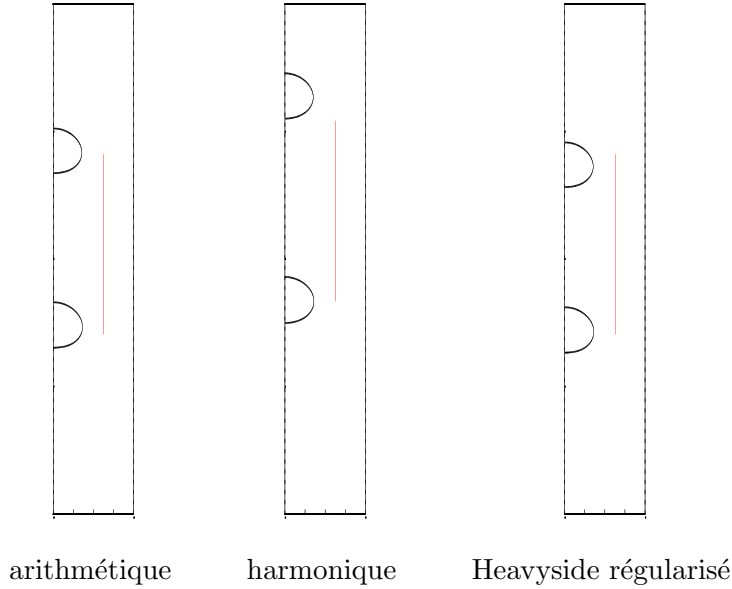


FIG. III.10 – Isovaleur 0.5 à $t = 0.1$ s et $t = 0.25$ s pour différentes régularisations de ρ et le trait plein correspond à la distance qu'aurait parcourue la bulle entre ces deux instants si sa vitesse avait été celle donnée dans [26]

III.4.2 Influence de la mobilité

Dans ce paragraphe, nous étudions l'influence de la mobilité pour le modèle de Cahn-Hilliard et celui de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes. On se place dans des configurations diphasiques.

La première illustration est l'évolution d'une bulle, initialement de forme ellipsoïdale, vers sa position d'équilibre où elle prend une forme sphérique (figure III.11). Seules les équations de Cahn-Hilliard sont résolues ($u \equiv 0$) et nous prenons une mobilité dégénérée, discrétisée explicitement

$$M_0^n = M c^{n2} (1 - c^n)^2.$$

Sur la figure III.12, nous présentons l'interface à différents instants pour différentes valeurs de M . Le trait plein représente la solution analytique à l'équilibre. On observe une évolution très différente selon les valeurs de M . Le paramètre M_0 étant le coefficient de diffusion dans l'équation vérifiée par c , lorsque M augmente, l'interface atteint sa position d'équilibre plus rapidement.

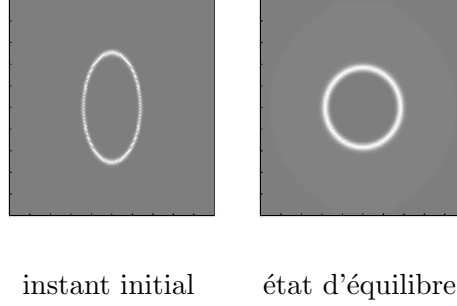


FIG. III.11 – Bulle à l'instant initial et à l'équilibre

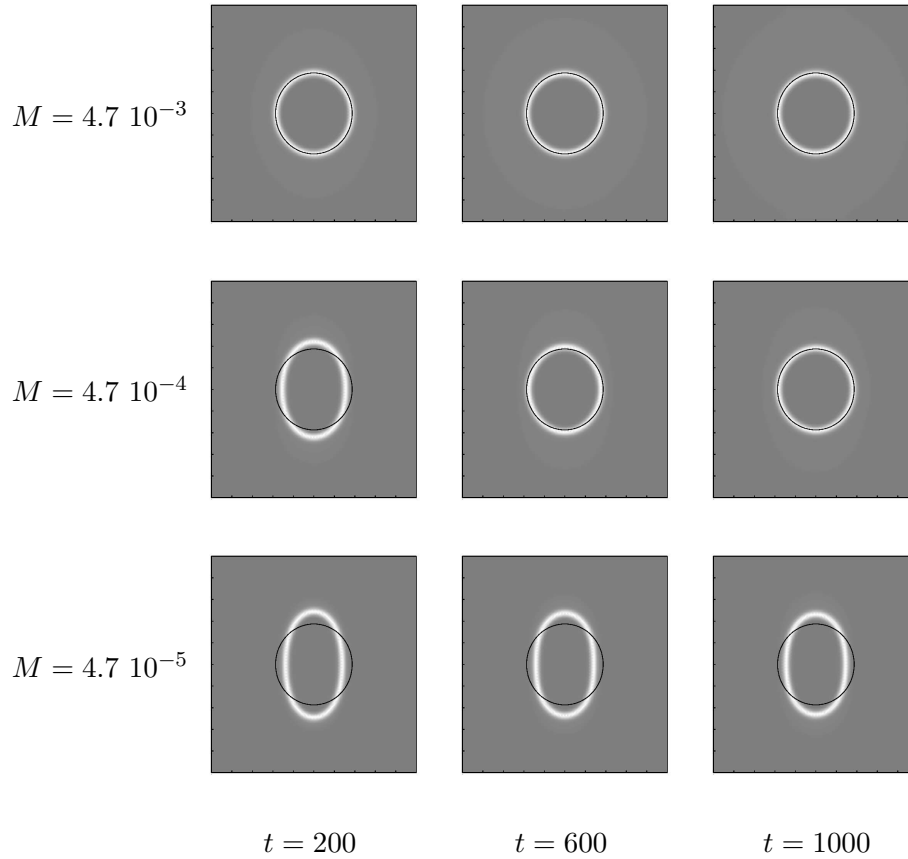


FIG. III.12 – Evolution de l'interface en fonction du temps avec $M_0 = Mc^2(1-c)^2$ pour différentes valeurs de M et visualisation de la solution analytique (trait plein) à l'équilibre

Il est intéressant d'étudier maintenant l'influence de la mobilité lorsque la bulle est en écoulement. Nous prenons la bulle initialement sphérique. D'après les propriétés physiques et la taille de la bulle, il est possible de prédire sa forme et sa vitesse de montée (§IV.1). Nous avons pris un

écoulement où la bulle se déforme sensiblement. Elle prend la forme d'une calotte sphérique avec des traînées sur le contour formant comme une "jupe" (bulle de type "skirted" dans la littérature [26]). Sur la figure III.13, nous observons que la mobilité influence peu la vitesse de la montée de la bulle mais intervient sur sa forme. Lorsque la mobilité est faible, le terme de transport est prépondérant dans l'équation d'évolution de c , entraînant une déformation de l'interface et augmentant la taille de l'épaisseur. En effet, dans les équations de Cahn-Hilliard, le terme $\nabla \cdot (M_0 \nabla \mu)$ contient des parties diffusives et anti-diffusives qui contribuent au maintien de l'épaisseur de l'interface ε au cours du temps.

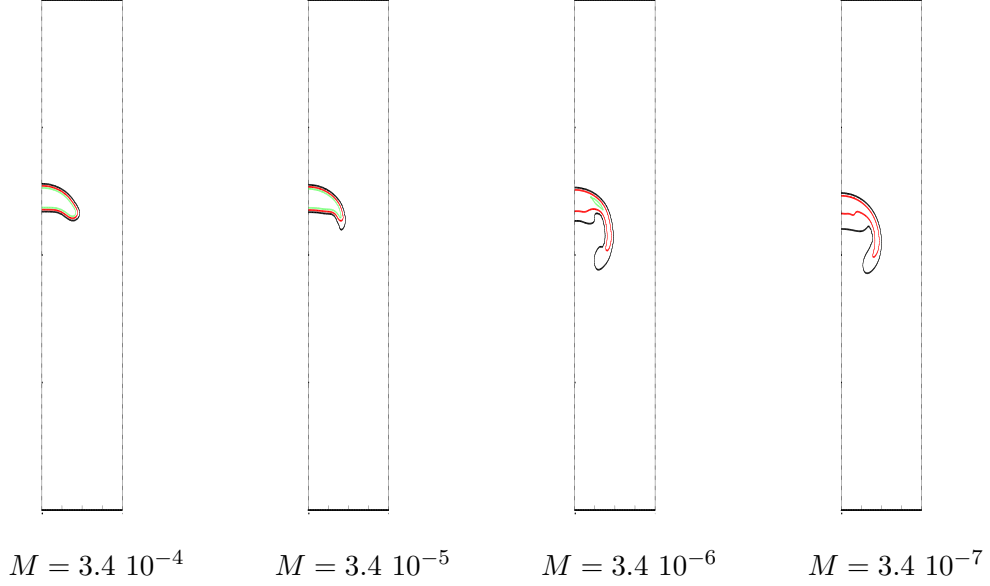


FIG. III.13 – Isovaleurs 0.1, 0.5 et 0.9 de c à $t = 0.85$ s avec $M_0 = Mc^2(1 - c)^2$ pour différentes valeurs de M

Finalement, il apparaît qu'il faut prendre la mobilité la plus faible conservant l'épaisseur de l'interface constante. Le choix du paramètre de mobilité est une des difficultés numériques du modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes.

III.4.3 Épaisseur d'interface et pas de maillage

Dans ce paragraphe, nous donnons un exemple d'une bulle piégée entre deux phases stratifiées où nous faisons varier le pas de maillage et l'épaisseur de l'interface.

On compare à l'équilibre, l'énergie libre discrète

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, h}^{\text{triph}}(t^{n+1}) = \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(\mathbf{c}_h^{n+1}) = \int_{\Omega} \frac{12}{\varepsilon} F(\mathbf{c}_h^{n+1}) dx + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_i |\nabla c_{ih}^{n+1}|^2 dx,$$

avec l'énergie du problème à interface infiniment fine définie par

$$\mathcal{F}_s = \sigma_{12}A_{12} + \sigma_{13}A_{13} + \sigma_{23}A_{23}$$

où A_{ij} est l'aire de l'interface entre la phase i et j .

Les phases ne sont pas soumises à la gravité et les propriétés physiques sont les mêmes dans les trois phases

$$\varrho_i = 1 \text{ kg.m}^{-3} \text{ et } \eta_i = 1 \text{ Pa.s.}$$

Le domaine d'étude (en m) est $[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$ (géométrie 2D cartésienne) et l'aire de la lentille est $1.14 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$. Nous prenons les trois tensions de surface égales à 1 N.m^{-1} . Connaissant les positions des interfaces à l'équilibre (§IV.2, annexe D), l'énergie \mathcal{F}_s vaut

$$\mathcal{F}_s \simeq 1.47 \cdot 10^{-1} \text{ J.}$$

Sur la figure III.14, nous observons l'évolution de $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, h}^{\text{triph}}$ au cours du temps pour différents maillages à $\varepsilon = 0.0028 \text{ m}$ fixé. Lorsqu'on raffine le maillage, on remarque que $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, h}^{\text{triph}}$ tend vers la valeur 0.146 à l'équilibre. L'écart entre cette valeur et celle de \mathcal{F}_s vient de l'épaississement de l'interface dans le modèle de Cahn-Hilliard.

En effet, lorsqu'on fait tendre ε vers 0 avec le maillage en prenant $\varepsilon = 3h$, on observe que la valeur de $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, h}^{\text{triph}}$, à l'équilibre, tend vers la valeur du problème à interface infiniment fine (figure III.15). Dans nos applications, nous prenons environ 2 à 3 mailles dans l'interface ce qui s'avère être un bon compromis entre précision et coût de calcul.

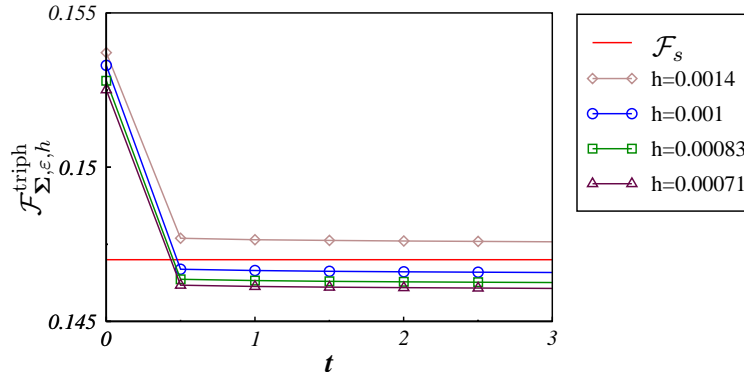


FIG. III.14 – Evolution de $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, h}^{\text{triph}}$ en fonction du temps pour différents maillages avec $\varepsilon = 0.0028 \text{ m}$

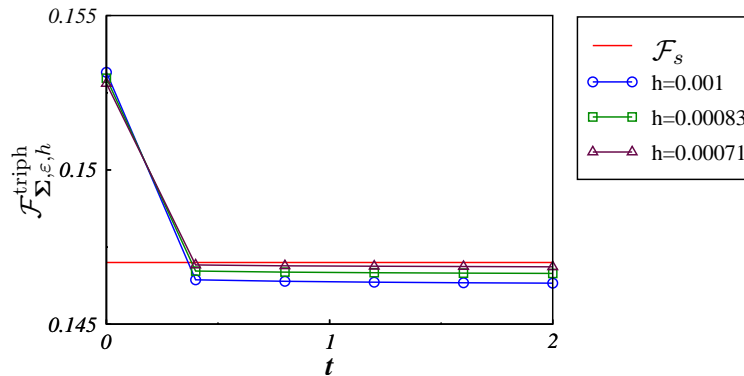


FIG. III.15 – Evolution de $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon, h}^{\text{triph}}$ en fonction du temps pour différents maillages avec $\varepsilon = 3h$ et position des interfaces à l'équilibre pour $h = 10^{-3}$ et $h = 7.1 \cdot 10^{-4}$

Chapitre IV

Applications numériques

Après avoir établi le modèle et décrit les schémas numériques utilisés, nous présentons dans ce chapitre les applications numériques suivantes : montée d'une bulle dans un liquide (situation diphasique), étalement d'une lentille entre deux phases stratifiées, ascension d'une bulle dans un bain stratifié et passage d'un train de bulles entre deux phases. À terme, le but est d'étudier le flux thermique entre deux phases stratifiées traversées par un train de bulles avec les propriétés physiques du corium pour l'étude de l'interaction corium-béton.

On s'intéresse tout d'abord à une configuration diphasique : l'ascension d'une bulle de gaz dans un milieu liquide semi-infini. Différents régimes de montée d'une bulle ont été cartographiés expérimentalement dans [26] en fonction de trois nombres sans dimension (nombres de Morton, d'Eötvös et de Reynolds). Chaque régime est caractérisé en particulier par la forme que prend la bulle lors de son ascension et par sa vitesse terminale. Nous étudierons certains de ces régimes. Cette étude a permis de valider les résultats obtenus pour la simulation d'une bulle dans un liquide avant d'étudier des écoulements triphasiques plus complexes.

La deuxième application est le cas classique de l'étalement d'une lentille entre deux phases stratifiées. Deux comportements sont étudiés : celui d'un étalement partiel (tous les coefficients Σ_i sont positifs) et celui d'un étalement total (il existe un coefficient Σ_i négatif). Lors d'un étalement partiel, on s'intéressera en particulier au calcul des angles de contact et des sauts de pression à l'équilibre. Cette étude a déjà servi d'illustration dans le chapitre I pour montrer l'importance des propriétés de consistance algébrique (§I.3.3) et dynamique (§I.3.5). De plus, l'étude sur l'existence des solutions faibles a montré qu'il faut considérer un potentiel de Cahn-Hilliard F d'ordre 6 lorsqu'un des coefficients de capillarité Σ_i est négatif, on a pu ainsi simuler les situations d'étalement total.

Nous étudions ensuite le comportement d'une bulle dans un bain stratifié composé de deux phases liquides. La bulle peut soit rester piégée dans l'interface liquide/liquide, soit pénétrer dans la phase légère. Lorsqu'il y a passage de la bulle à travers l'interface, celle-ci peut entraîner de la phase lourde dans la phase légère. Ces comportements ont été étudiés expérimentalement par Greene *et al.* [50] qui proposent des critères simples sur le volume de la bulle pour prédire le passage de celle-ci et l'entraînement du fluide lourd.

On s'intéresse ensuite à des écoulements anisothermes. L'objectif est d'étudier la variation du flux thermique entre deux phases stratifiées lors du passage d'une bulle et d'un train de bulles. Cette application a permis la mise en place d'outils : calcul approché du flux thermique à travers une interface (calcul d'une intégrale volumique), création d'un train de bulles (utilisation de conditions au bord de Dirichlet pour les paramètres d'ordre) qui serviront à l'étude des transferts de chaleur entre deux phases stratifiées dans un écoulement à bulles dans le cadre de l'interaction corium/béton.

Enfin, nous présentons les premiers résultats obtenus dans le cas réacteur lors du passage d'une bulle à travers une interface entre la phase oxyde et le métal du corium. Cependant, des difficultés numériques sont observées pour ces écoulements (caractérisés par des tensions de surface grandes, des écarts de masses volumiques importants et une faible viscosité dans la phase métallique). Il faudra donc améliorer les schémas numériques afin de pouvoir poursuivre cette étude.

Tous les paramètres physiques et numériques des résultats présentés dans la suite sont rassemblés dans l'annexe F. Les équations de Cahn-Hilliard sont résolues en conservant les inconnues c_1 et c_2 ($c_3 = 1 - c_1 - c_2$).

IV.1 Montée d'une bulle dans un liquide

On considère ici le problème de l'ascension d'une bulle dans un milieu infini sous l'effet des forces de flottabilité. Bien que ce système soit instationnaire, il est possible de classer les structures d'écoulement en plusieurs catégories, chacune d'elles étant caractérisée par une forme particulière que la bulle adopte. Ces régimes ont été cartographiés expérimentalement en fonction de trois nombres adimensionnels ([26], tableau IV.1) :

- le nombre de Morton

$$\mathbf{M} = \frac{g\eta_\ell^4(\varrho_\ell - \varrho_b)}{\varrho_\ell^2\sigma^3},$$

- le nombre d'Eötvös (également appelé nombre de Bond)

$$\mathbf{Eo} = \frac{g(\varrho_\ell - \varrho_b)d_b^2}{\sigma},$$

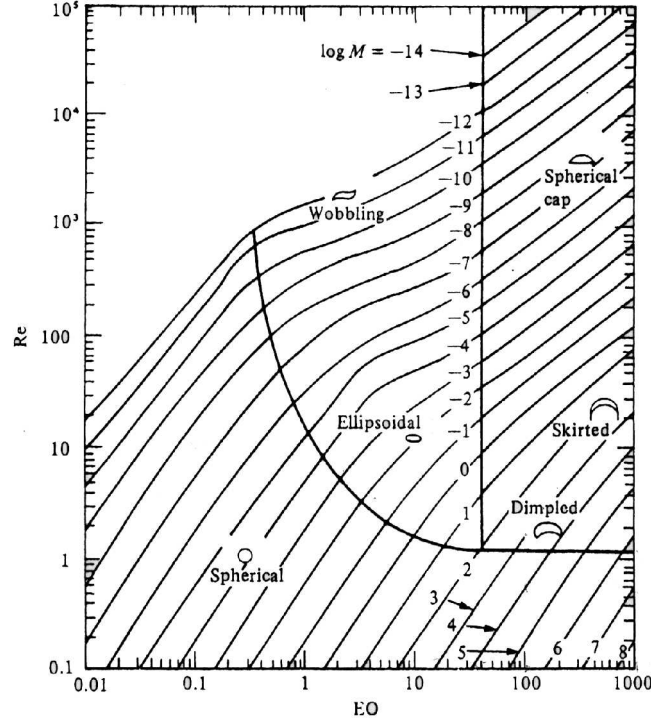
- le nombre de Reynolds

$$\mathbf{Re} = \frac{\varrho_\ell d_b u_T}{\eta_\ell},$$

où l'indice b réfère à la bulle, l'indice ℓ au liquide et d_b désigne le diamètre d'une sphère de volume équivalent à celui de la bulle. Le nombre de Morton dépend seulement des propriétés des fluides en présence. Le nombre d'Eötvös qui caractérise le rapport entre les forces de gravité et les forces de tension de surface dépend en particulier du diamètre de la bulle. Enfin, le nombre de Reynolds représentant le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses est lié à la vitesse terminale u_T de la bulle.

Dans le tableau IV.1, trois régimes sont répertoriés selon la forme que prend la bulle.

1. "Spherical" : la bulle prend la forme d'une sphère. C'est le cas lorsque les forces de tension de surface et/ou les forces visqueuses prédominent sur les forces d'inertie (faible nombre de Reynolds et/ou faible nombre d'Eötvös).
2. "Ellipsoidal" : la bulle s'étire dans la direction horizontale et prend la forme d'une ellipse. Ce comportement est observé pour des valeurs du nombre de Reynolds supérieures à 1 et pour des valeurs du nombre d'Eötvös intermédiaires ($1 < \mathbf{Eo} < 100$). Lorsque le nombre de Reynolds est grand, la bulle peut osciller. Ce régime est appelé "Wobbling".
3. "Spherical cap" : la bulle prend la forme d'une calotte sphérique. Cette forme est caractéristique des bulles de grande taille ($\mathbf{Eo} > 40$) pour des nombres de Reynolds supérieurs à 1. Pour des faibles nombres de Reynolds ($\mathbf{Re} < 10$) la bulle prend une forme de calotte sphérique creusée dans sa partie inférieure, notée "Dimpled". Pour des grandes valeurs du nombre d'Eötvös ($\mathbf{Eo} > 600$) et des nombres de Reynolds inférieurs à 100, des trainées tout autour de la calotte sont observées comme si celle-ci avait une "jupe", d'où la dénomination "Skirted".

TAB. IV.1 – Diagramme de différents régimes de montée de bulle sous l'effet de la gravité, Clift *et al.* ([26], 1978)


Nous reprenons la démarche proposée par Meier *et al.* [76] qui utilisent la méthode "Volume of Fluid". On fixe les masses volumiques, le rapport des viscosités et la tension de surface. Nous prenons pour ces paramètres les propriétés de l'eau et l'air

$$\begin{cases} \sigma = 0.07 \text{ N.m}^{-1}, \\ \varrho_b = 1 \text{ kg.m}^{-3}, \quad \varrho_\ell = 1000 \text{ kg.m}^{-3}, \\ \eta_\ell = 10^2 \eta_b \text{ Pa.s.} \end{cases}$$

On fait ensuite varier les nombres adimensionnels \mathbf{M} , \mathbf{Eo} , \mathbf{Re} , pour simuler différents régimes de montées de bulle. On s'intéresse en particulier aux régimes "Dimpled", "Skirted", "Ellipsoïdal" et "Spherical cap". Le choix du nombre de Morton nous impose les valeurs des viscosités

$$\eta_\ell = \left(\frac{\mathbf{M} \varrho_\ell^2 \sigma^3}{g(\varrho_\ell - \varrho_b)} \right)^{\frac{1}{4}} \text{ et } \eta_b = 10^{-2} \eta_\ell$$

et celui du nombre d'Eötvös fixe la valeur du diamètre de la bulle

$$d_b = \left(\frac{\mathbf{Eo} \sigma}{g(\varrho_\ell - \varrho_b)} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Connaissant les nombres d'Eötvös et de Morton, le tableau IV.1 nous permet de connaître le nombre de Reynolds et sachant le diamètre de la bulle, on en déduit la vitesse terminale de montée observée par Clift *et al.* [26]

$$u_T = \frac{\mathbf{Re} \eta_\ell}{\varrho_\ell d_b}.$$

On note $r_b = \frac{d_b}{2}$ le rayon équivalent.

Le problème est résolu en géométrie 3D axisymétrique sur un domaine cylindrique de hauteur $18r_b$ et dont le rayon de la base vaut $3r_b$ (figure IV.1).

Les conditions au bord sont

$$\begin{aligned}
 \nabla c_i \cdot n &= 0 \text{ et } M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0, & \text{sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4, \\
 u \cdot n &= 0 \text{ et } (2\eta D(u)n - pn) \cdot t = 0, & \text{sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_3, \\
 u &= 0, & \text{sur } \Gamma_2, \\
 2\eta D(u)n - pn &= 0, & \text{sur } \Gamma_4.
 \end{aligned}$$

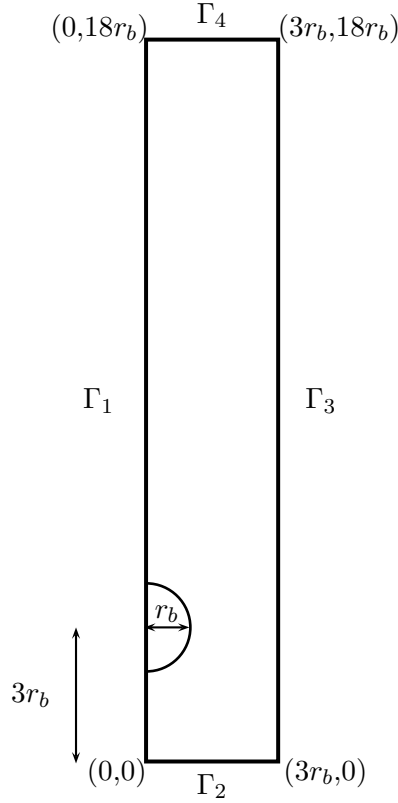


FIG. IV.1 – Domaine de calcul pour l'étude de l'ascension d'une bulle

IV.1.1 Régimes "Dimpled", "Ellipsoidal" et "Skirted"

Pour la simulation des régimes "Dimpled", "Ellipsoidal" et "Skirted", la bulle est initialement sphérique. Nous prenons les mêmes valeurs pour les nombres adimensionnels que dans [76]. Nous résumons les différents paramètres pour les trois régimes dans le tableau IV.2.

Sur la figure IV.2, nous observons l'évolution de la montée de la bulle pour les différents régimes. Les tailles des domaines et des bulles sont différentes pour chacune des simulations ainsi que les instants où on visualise les isovaleurs. Pour les trois régimes simulés, nous obtenons des résultats satisfaisants par rapport aux formes données par le diagramme IV.1 de Clift *et al.* Pour le régime "Dimpled", la bulle est moins creusée que dans [76] où elle finit par prendre une forme toroïdale. Pour le régime "Skirted", nous observons des petites traînées autour de la calotte sphérique qui

TAB. IV.2 – Nombres adimensionnels et paramètres physiques pour différents régimes de montée de bulle : "Dimpled", "Ellipsoidal", "Skirted"

	M	Eo	Re	η_ℓ (Pa.s)	d_b (m)	u_T (m.s ⁻¹)
"Dimpled"	$10^{3.5}$	160	2	3.24	0.033	0.19
"Ellipsoidal"	$10^{-2.1}$	10	12	0.129	$8.5 \cdot 10^{-3}$	0.18
"Skirted"	$10^{2.2}$	600	23	1.53	$6.5 \cdot 10^{-2}$	0.54

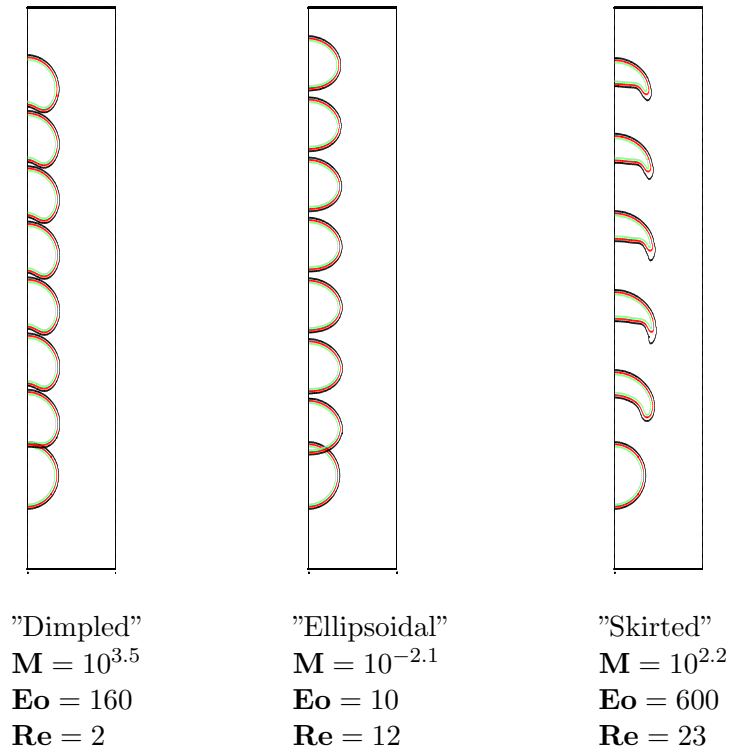


FIG. IV.2 – Evolution des isovalues 0.3, 0.5 et 0.7 du paramètre d'ordre pour différents régimes de montée de bulle : "Dimpled", "Ellipsoidal", "Skirted"

sont caractéristiques de cet écoulement. Sur la figure IV.3, nous faisons varier la mobilité et nous remarquons que la taille de ces traînées augmente quand la mobilité diminue. Par contre, il y a un épaissement de l'interface dans la partie inférieure de la bulle (voir §III.4.2 sur l'influence de la mobilité).

On s'intéresse maintenant à la vitesse terminale de la bulle pour les différents régimes. Sur la figure IV.4, nous visualisons la position de la bulle, obtenue par simulation, à deux instants donnés. Le trait vertical correspond à la distance qu'aurait parcourue la bulle entre ces deux instants si sa vitesse avait été constante, égale à celle donnée par le diagramme IV.1 de Clift *et al.* Pour les trois régimes, la vitesse obtenue est plus faible que celle donnée par le diagramme, en particulier pour le

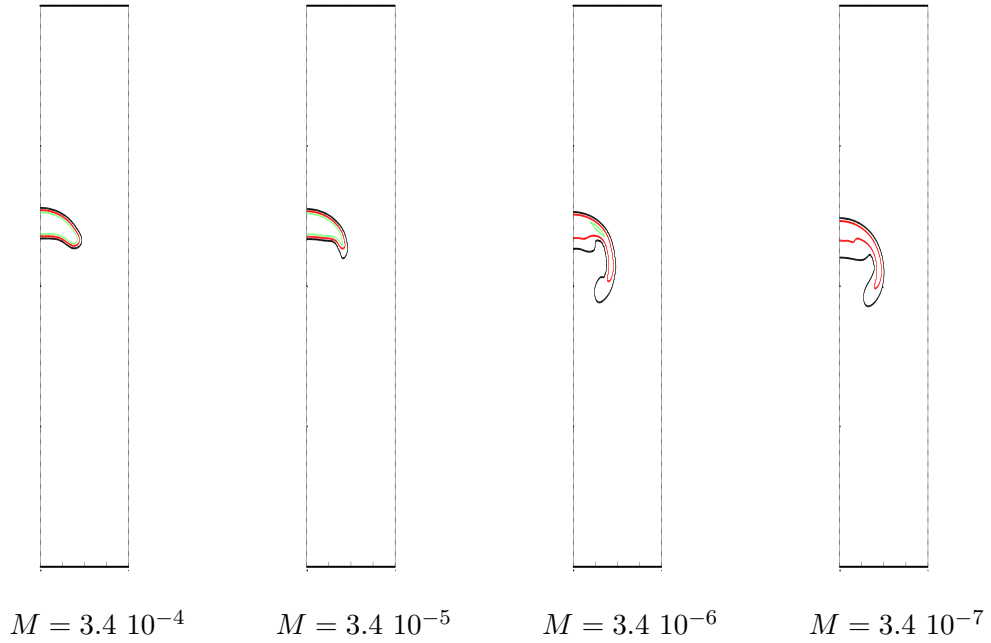


FIG. IV.3 – Isovaleurs 0.3, 0.5 et 0.7 de c à $t = 0.6$ s avec $M_0 = Mc^2(1-c)^2$ pour différentes valeurs de M pour le régime "Skirted" de montée de bulle

régime "Skirted". Ce comportement est dû probablement à la déformation de l'interface, provoquée par les mouvements convectifs, qui entraîne une diminution de la taille de la bulle (figure IV.2). En effet, sur la figure IV.5, nous visualisons une coupe du paramètre d'ordre c en fonction de r pour le régime "Skirted" et nous remarquons que dans le sillage de la bulle, c est non nul. Comme la moyenne du paramètre d'ordre est conservée, on observe une diminution de la taille de la bulle.

Sur les figures IV.6 et IV.7, nous visualisons les fonctions de courant et les vitesses. Celles-ci sont proches de celles observées dans [95] où la méthode "Level-Set" est utilisée. Pour les trois régimes, les vitesses sont plus importantes dans la bulle et on observe une recirculation de chaque côté de celle-ci.

Finalement, les résultats obtenus sont satisfaisants. La vitesse terminale calculée est plus faible que les données expérimentales répertoriées dans le diagramme IV.1 de Clift *et al.* Il faudrait étudier l'influence d'une stabilisation pour le terme d'advection dans les équations de Cahn-Hilliard sur les distorsions de l'interface qui ont été observées pour le régime "Skirted".

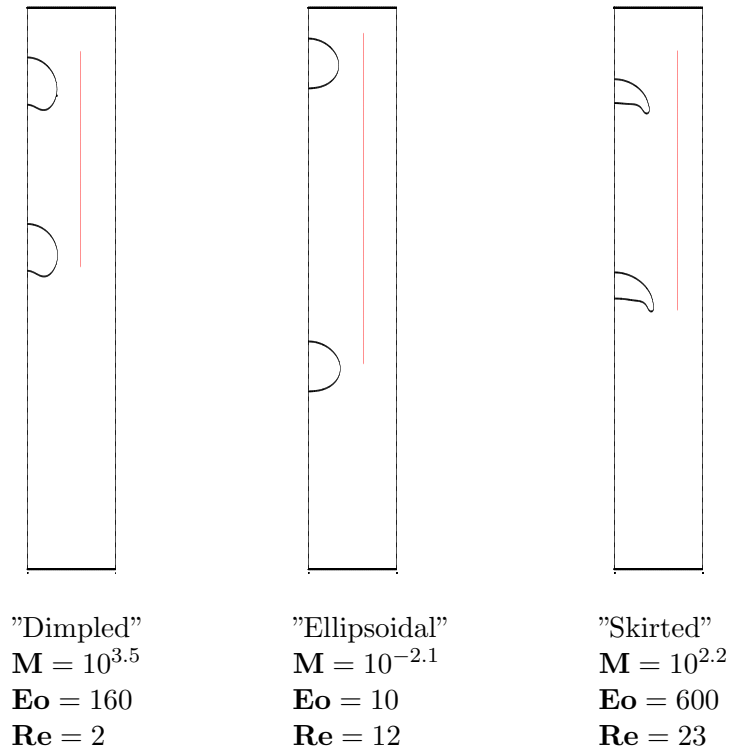


FIG. IV.4 – Isovaleurs 0.5 du paramètre d'ordre à deux instants pour différents régime de montée de bulle : à $t = 0.8$ s et $t = 1.4$ s pour le régime "Dimpled"; à $t = 0.1$ s et $t = 0.35$ s pour le régime "Ellipsoidal"; à $t = 0.45$ s et $t = 0.95$ s pour le régime "Skirted". Le trait vertical correspond à la distance qu'aurait parcourue la bulle entre ces deux instants si sa vitesse avait été celle calculée à partir du diagramme IV.1 de [26]

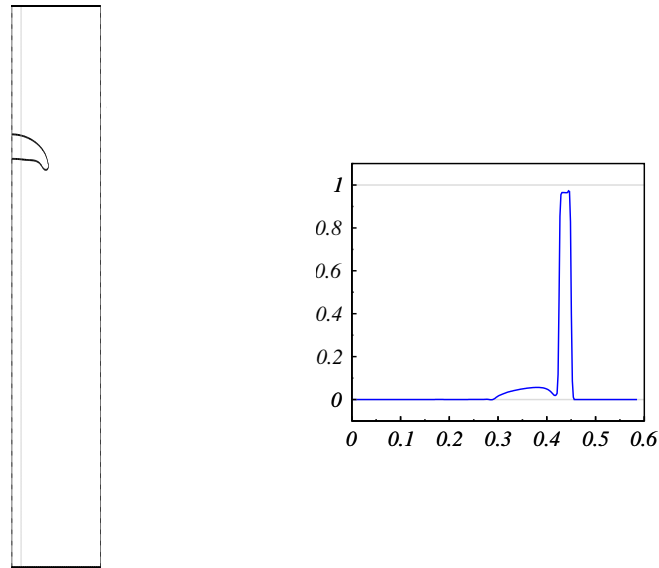


FIG. IV.5 – Vue en coupe du paramètre d'ordre en $r = 0.01$ m pour le régime "Skirted" à $t = 0.8$ s

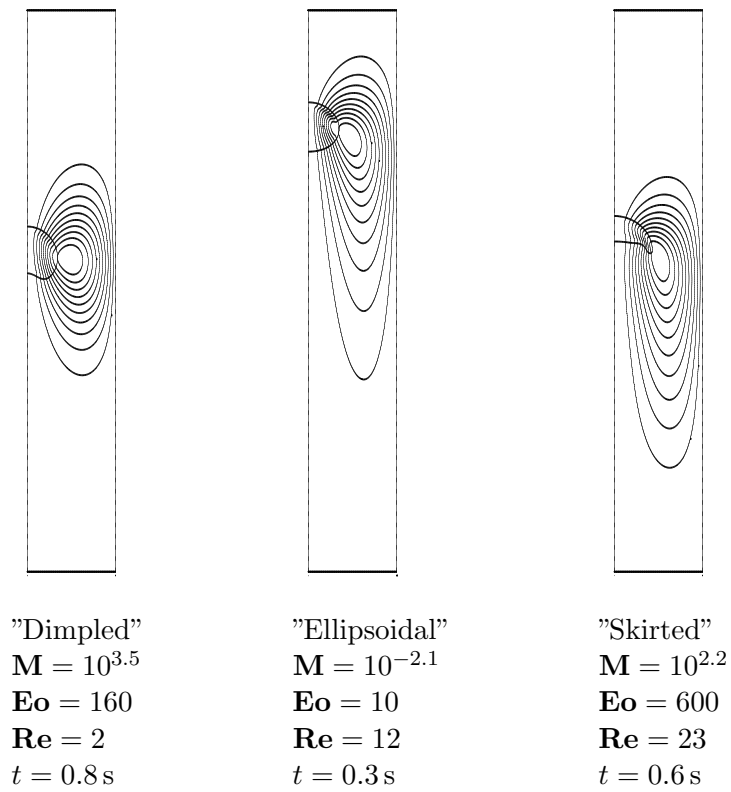


FIG. IV.6 – Fonctions de courant pour différents régimes de montée de bulle : "Dimpled", "Ellipsoidal", "Skirted"

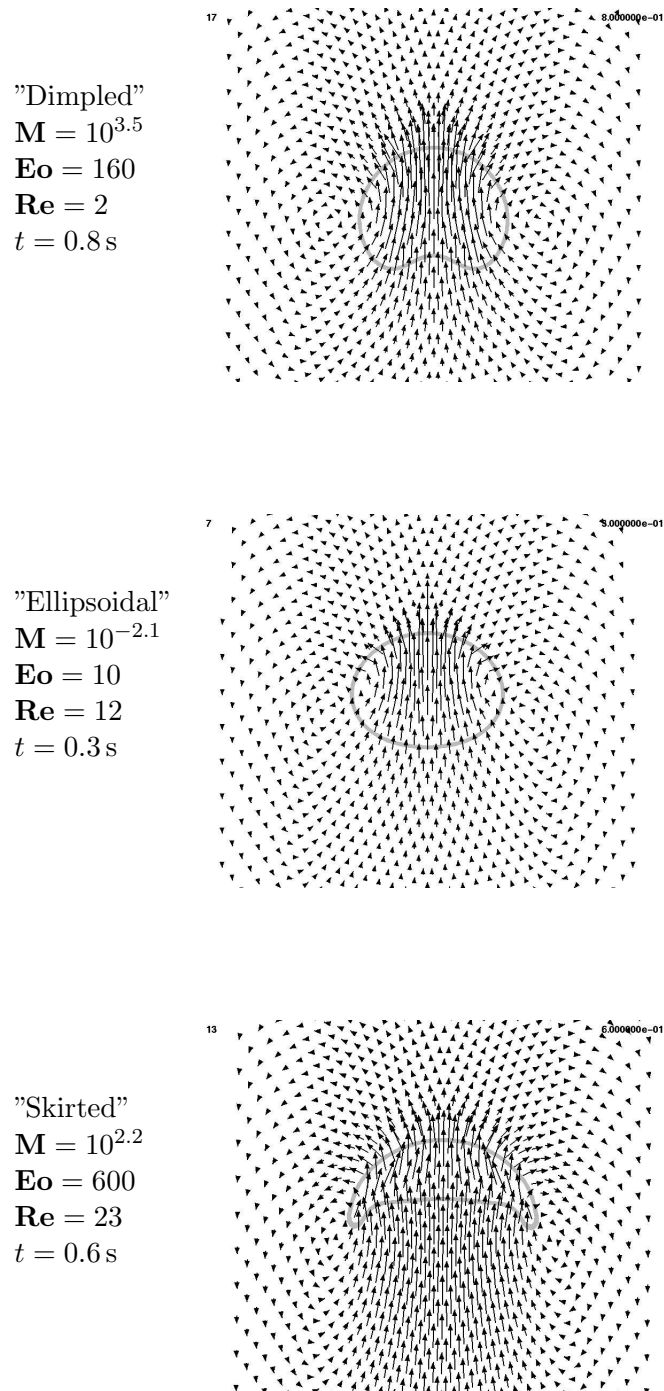


FIG. IV.7 – Quelques vecteurs vitesses pour trois régimes de montée de bulle : "Dimpled", "Ellipsoidal", "Skirted"

IV.1.2 Régime "Spherical cap"

Dans les situations où le nombre d'Eötvös est grand et le nombre de Morton est faible (généralement lorsque les bulles sont de grande taille), la bulle prend la forme d'une calotte sphérique d'après le diagramme IV.1. Numériquement, il a été observé que pour le régime "Spherical cap", elle prenait la forme d'un tore lorsqu'elle est initialement sphérique. Ces observations ont été faites pour différentes techniques de simulations, comme par exemple, pour la méthode "Level-set" (LS) [98], la méthode "Volume of fluid" (VOF) [25] et une méthode couplée "CLSVOF" [83]. Expérimentalement, Walters et Davidson [104] étudient la formation de bulles d'air de grande taille dans de l'eau. Selon la technique utilisée pour générer la bulle, ils observent que parfois celle-ci prend la forme d'un tore.

Dans [83], les auteurs s'intéressent à l'influence de l'initialisation de la bulle pour la simulation de différents régimes. Ils constatent que pour le régime "Spherical cap", la bulle prend une forme différente selon la condition initiale. Ainsi, si elle est initialement sphérique alors elle prend la forme d'un tore, par contre si sa forme initiale est proche de celle d'une calotte, elle se déforme peu.

Nous retrouvons numériquement ces comportements. On utilise un maillage plus fin que dans le paragraphe précédent car sinon la taille de la bulle diminue de manière trop importante (comportement déjà observé dans §III.1.5 et §IV.1.1). On prend $\mathbf{M} = 10^{-7.6}$, $\mathbf{Eo} = 320$ et $\mathbf{Re} = 4200$ et on a

$$\begin{cases} \eta_\ell = 5.4 \cdot 10^{-3} \text{ Pa.s,} \\ d_b = 0.048 \text{ m,} \\ u_T = 0.48 \text{ m.s}^{-1}. \end{cases}$$

Sur la figure IV.8, on constate que lorsque la bulle est initialement sphérique, celle-ci prend rapidement la forme d'un tore. Comme on ne représente qu'une section du domaine cylindrique, lorsque le tore se rapproche du bord extérieur Γ_3 , la partie de la bulle visualisée devient plus petite mais son volume dans le domaine 3D reste constant (figure IV.9).

Nous prenons ensuite comme condition initiale une bulle ayant la forme d'une calotte (obtenue en prenant une viscosité plus importante, voir l'annexe F). Sur la figure IV.10, nous observons que celle-ci se déforme peu et prend ensuite une forme plus creusée dans sa partie inférieure. La vitesse obtenue est un peu plus faible que celle donnée par le diagramme IV.1 de Clift *et al.* Sur la figure IV.11, on obtient des vitesses similaires à celles présentées par Ohta *et al.* [83] (figure 8, condition 2). On remarque qu'elles sont plus importantes dans le sillage de la bulle où on observe des recirculations.

En conclusion, comme dans [83] nous obtenons des écoulements différents pour le régime "Spherical cap" selon la donnée initiale utilisée. De plus, les résultats obtenus sont satisfaisants lorsque la bulle prend la forme d'une calotte.

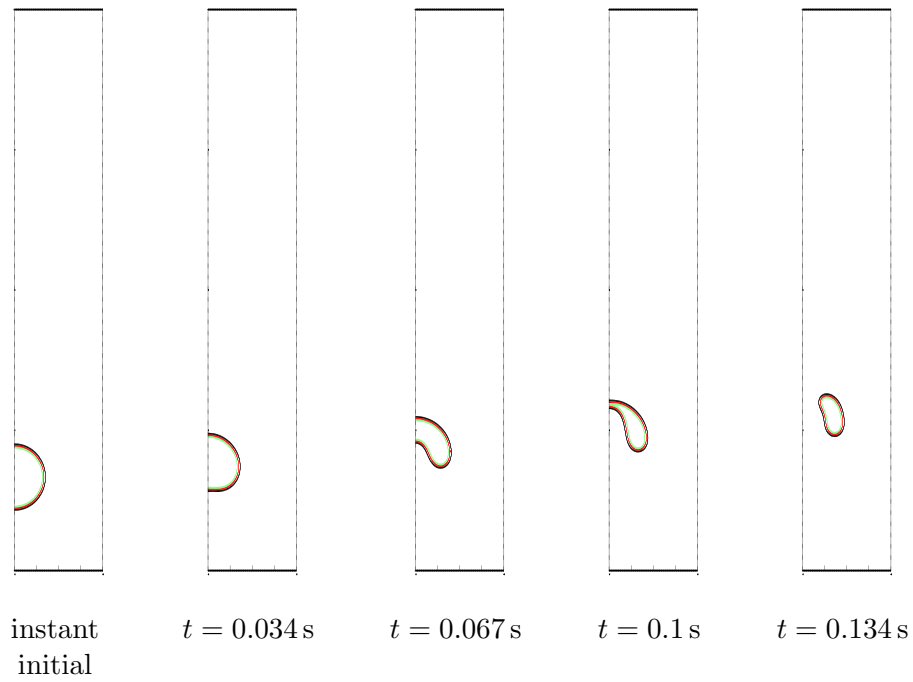


FIG. IV.8 – Evolution des isovaleurs 0.3, 0.5 et 0.7 du paramètre d'ordre pour $\mathbf{M} = 10^{-7.6}$, $\mathbf{Eo} = 320$ et $\mathbf{Re} = 4200$ à différents instants lorsque la bulle est initialement sphérique : formation d'un tore

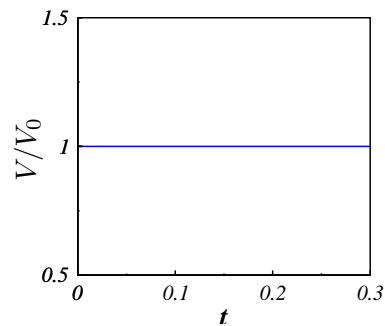


FIG. IV.9 – Evolution du volume V de la bulle normalisé par le volume initial V_0 lorsque la bulle prend la forme d'un tore

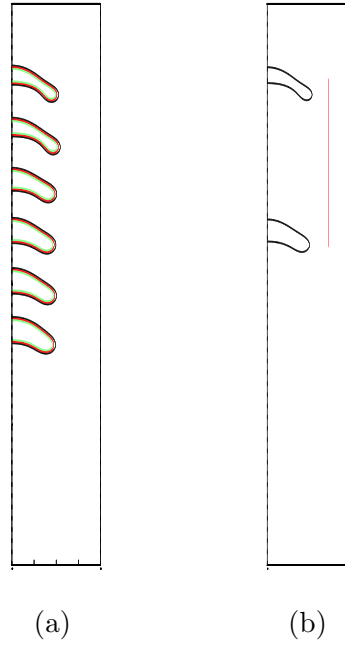


FIG. IV.10 – Configuration où $\mathbf{M} = 10^{-7.6}$, $\mathbf{Eo} = 320$ et $\mathbf{Re} = 4200$ et la bulle est initialisée sous la forme d'une calotte (a) Evolution des isovaleurs 0.3, 0.5 et 0.7 du paramètre d'ordre (b) Isoaleur 0.5 de c à deux instants $t = 0.43\text{s}$ et $t = 0.7\text{s}$, le trait vertical correspond à la distance qu'aurait parcourue la bulle entre ces deux instants si sa vitesse avait été celle donnée dans [26]

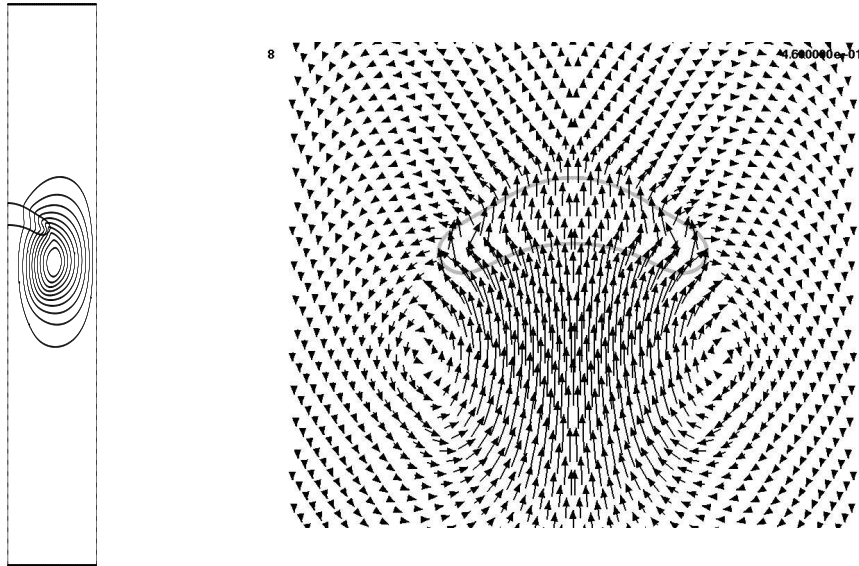


FIG. IV.11 – Visualisation des fonctions de courant et de quelques vecteurs vitesses à $t = 0.46\text{s}$ lorsque la bulle est initialisée sous la forme d'une calotte pour $\mathbf{M} = 10^{-7.6}$, $\mathbf{Eo} = 320$ et $\mathbf{Re} = 4200$

IV.2 Lentille piégée entre deux phases stratifiées

On s'intéresse maintenant au cas classique d'une lentille, initialement sphérique, piégée entre deux phases stratifiées [70, 94]. On suppose que les phases ne sont pas soumises à la gravité.

Les positions des interfaces à l'équilibre dépendent, entre autre, des paramètres $(S_i)_i$ définis par

$$S_i = \sigma_{jk} - \sigma_{ij} - \sigma_{ik}, \text{ pour } i = 1, 2, 3 \text{ et } (i, j, k) \text{ deux à deux distincts.}$$

Le coefficient S_i est appelé paramètre d'étalement de la phase i entre les phases j et k [87, 89].

Remarque IV.2.1

Les coefficients S_i sont les opposés des coefficients de capillarité Σ_i introduits dans le chapitre I (équation (I.25))

$$S_i = -\Sigma_i.$$

Si ces coefficients sont tous strictement négatifs (i.e. $\Sigma_i > 0$), la lentille s'étale *partiellement*. C'est une condition pour qu'il y ait existence des points triples à l'équilibre. Si un des coefficients S_i est positif ou nul, la phase i associée va s'étaler *totale*ment entre les deux autres phases. A l'équilibre, il n'y a alors pas de points triples ([87, 89], annexe D, figure IV.12).

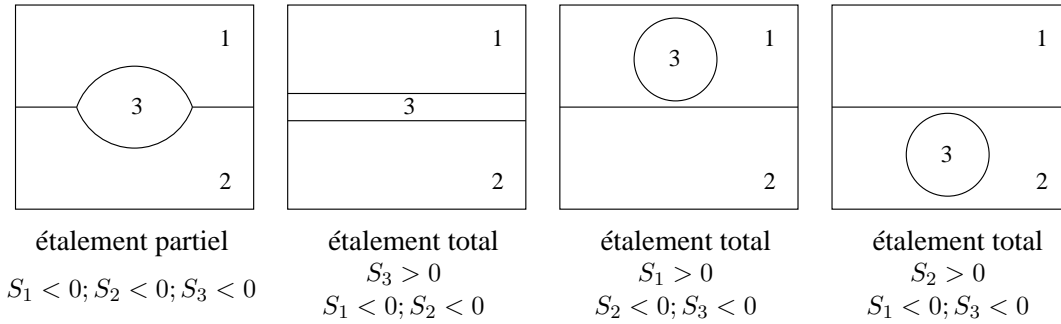


FIG. IV.12 – Etalement *partiel* ou *total* d'une phase entre deux autres

Nous allons présenter la simulation de ces différents comportements. Le domaine d'étude (en m) est $[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$ (géométrie 2D cartésienne) et les conditions au bord sont

$$\begin{aligned} \nabla c_i \cdot n &= M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0, \\ u &= 0. \end{aligned}$$

La lentille est initialement sphérique de rayon $r_b = 0.012$ m.

IV.2.1 Etalement partiel

Dans le cas d'un étalement partiel, l'état d'équilibre lorsqu'on considère les interfaces infiniment fines ($\varepsilon \rightarrow 0$), peut être calculé analytiquement (annexe D) : la forme de la lentille est donnée par l'intersection de deux disques tels que les trois angles de contact $\theta_1, \theta_2, \theta_3$, définis sur la figure IV.13 vérifient la relation de Young

$$\frac{\sin \theta_1}{\sigma_{23}} = \frac{\sin \theta_2}{\sigma_{13}} = \frac{\sin \theta_3}{\sigma_{12}}.$$

Relation de Young :

$$\frac{\sin \theta_1}{\sigma_{23}} = \frac{\sin \theta_2}{\sigma_{13}} = \frac{\sin \theta_3}{\sigma_{12}}$$

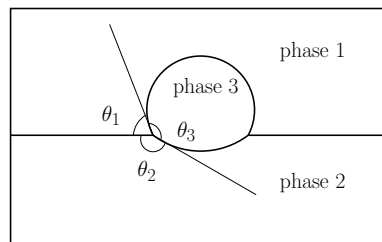


FIG. IV.13 – Forme de la lentille à l'équilibre et angles de contact aux points triples

Nous résolvons ici le système de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes (III.1)-(III.4) en l'absence de gravité. Les masses volumiques et les viscosités sont uniformes et valent respectivement 1 kg.m^{-3} et 1 Pa.s . Comme on s'intéresse à un étalement partiel, les paramètres S_i sont négatifs (i.e. tous les coefficients Σ_i sont positifs), nous pouvons donc prendre $F = F_0$ comme potentiel de Cahn-Hilliard.

Nous faisons varier les valeurs du triplet de tensions de surface (σ_{12} , σ_{13} , σ_{23}), les différents résultats sont donnés dans la figure IV.14. La zone blanche, correspondant aux points où

$$(1 - c_1)(1 - c_2)(1 - c_3) > \frac{3}{16},$$

décrit la zone interfaciale obtenue par le modèle de Cahn-Hilliard et le trait plein correspond à la localisation des interfaces infiniment fines, calculées analytiquement. On remarque sur la figure IV.14 que la position des interfaces et les angles de contact sont correctement calculés.

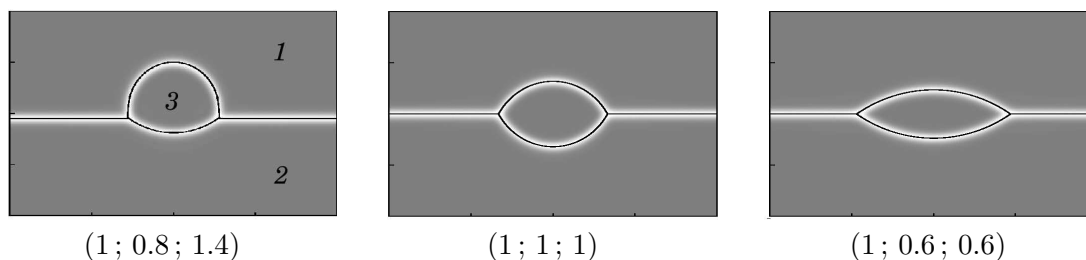


FIG. IV.14 – Etats d'équilibre obtenus avec $F = F_0$ pour différents triplets de tensions de surface ($\sigma_{12}; \sigma_{13}; \sigma_{23}$) (en N.m^{-1}) pour des situations d'étalement partiel

A l'équilibre, en l'absence de forces extérieures, la vitesse théorique est nulle et les pressions sont uniformes dans chacune des phases. L'écart de pression entre les phases est donné par la loi de Laplace qui s'écrit en 2D

$$p_i - p_j = \frac{\sigma_{ij}}{r},$$

où r est le rayon de courbure de l'interface entre les phases i et j au point considéré. Dans notre cas, on a les relations suivantes

$$\begin{cases} p_1 = p_2, \\ \frac{\sigma_{13}}{r_1} = p_3 - p_1 = p_3 - p_2 = \frac{\sigma_{23}}{r_2} \end{cases} \quad (\text{IV.1})$$

où r_i est le rayon du cercle composant l'interface entre la phase i et la lentille. Pour différents triplets de tensions de surface, on étudie le saut de pression en faisant varier le pas de maillage h . On remarque sur la figure IV.15 et dans le tableau IV.3 que le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes donne des résultats satisfaisants.

Par contre, la vitesse calculée numériquement n'est pas nulle mais très faible. On observe la présence de courants parasites qui est un problème commun aux méthodes où la force de tension de surface est approchée par une force volumique [62, 90, 95]. Ces courants diminuent lorsque le système tend vers sa position d'équilibre. En effet, sur la figure IV.16, on remarque que l'énergie cinétique définie par

$$k_e = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho u^2 dx$$

diminue au cours du temps pour les différents triplets de tensions de surface étudiés.

TAB. IV.3 – Erreur relative pour le saut de pression pour différents triplets de tensions de surface $(\sigma_{12}; \sigma_{13}; \sigma_{23})$ à $t = 7.5$ pour des situations d'étalement partiel

$(\sigma_{12}; \sigma_{13}; \sigma_{23})$	$p_3 - p_2 = p_3 - p_1$	erreur relative			
		$h = 1.4 \cdot 10^{-3}$	$h = 10^{-3}$	$h = 8.3 \cdot 10^{-4}$	$h = 7 \cdot 10^{-4}$
(1 ; 0.8 ; 1.4)	57.87	3.1%	2.3%	2%	1.9%
(1 ; 1 ; 1)	52.11	3.05%	2.1%	1.8%	1.7%
(1 ; 0.6 ; 0.6)	14.11	3.9%	2.7%	2.6%	2.5%

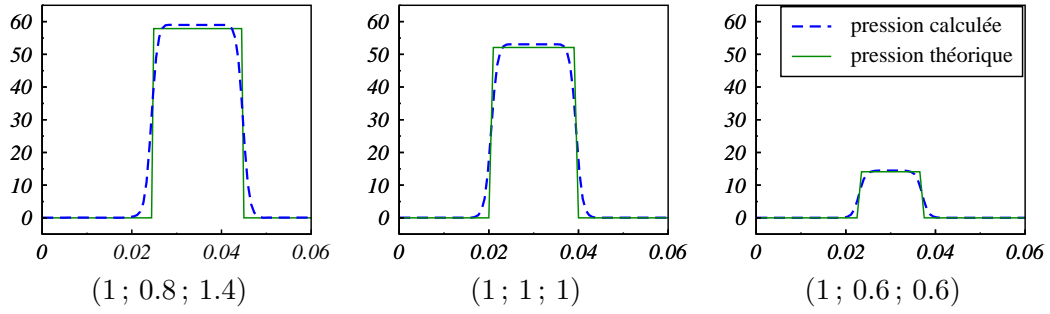


FIG. IV.15 – Vue en coupe de la pression en $x = 0.05$ pour différents triplets de tensions de surface $(\sigma_{12}; \sigma_{13}; \sigma_{23})$ à $t = 7.5$ s pour des situations d'étalement partiel

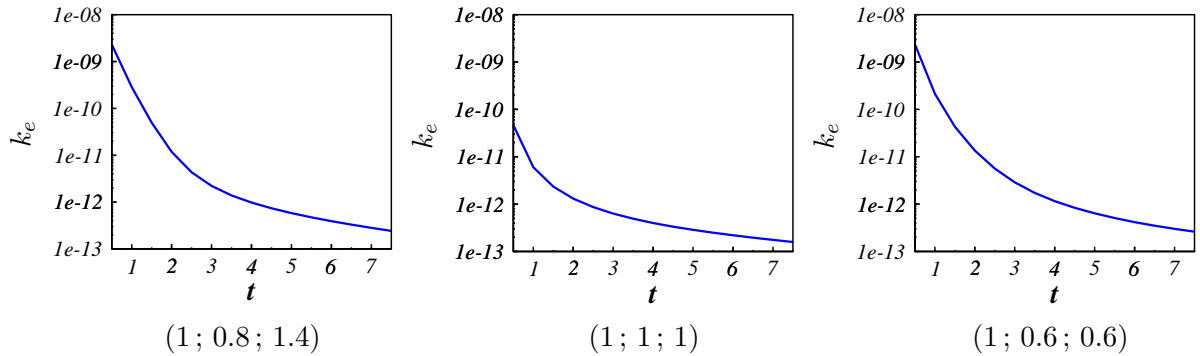


FIG. IV.16 – Evolution de l'énergie cinétique pour différents triplets de tensions de surface $(\sigma_{12}; \sigma_{13}; \sigma_{23})$ dans des situations d'étalement partiel (seuls les instants $t > 0.5$ sont représentés, la vitesse initiale étant uniformément nulle)

IV.2.2 Étalement total

Dans le cas où un des paramètres S_i est positif, l'étalement est total. Afin d'évaluer la pertinence du modèle (I.10) dans lequel on prend $F = F_{\Lambda,0}$, on considère le système de Cahn-Hilliard non couplé avec les équations de Navier-Stokes. On prend $\Lambda = 7$ afin d'assurer les propriétés de consistance.

Deux configurations d'étalement total sont simulées : celle de la lentille entre les deux fluides stratifiés et celle de la phase supérieure entre la lentille et la phase inférieure. Les tensions de surface (en N.m^{-1}) sont

- pour l'étalement de la lentille : $(\sigma_{12}; \sigma_{13}; \sigma_{23}) = (3; 1; 1)$, $\Sigma_3 < 0$,
- pour l'étalement de la phase supérieure : $(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}) = (1; 1; 3)$, $\Sigma_1 < 0$.

On remarque sur la figure IV.17 que dans les deux cas, la phase s'étale de manière à faire disparaître les points triples. Ensuite le système tend vers sa position d'équilibre : les interfaces sont planes ou sphériques.

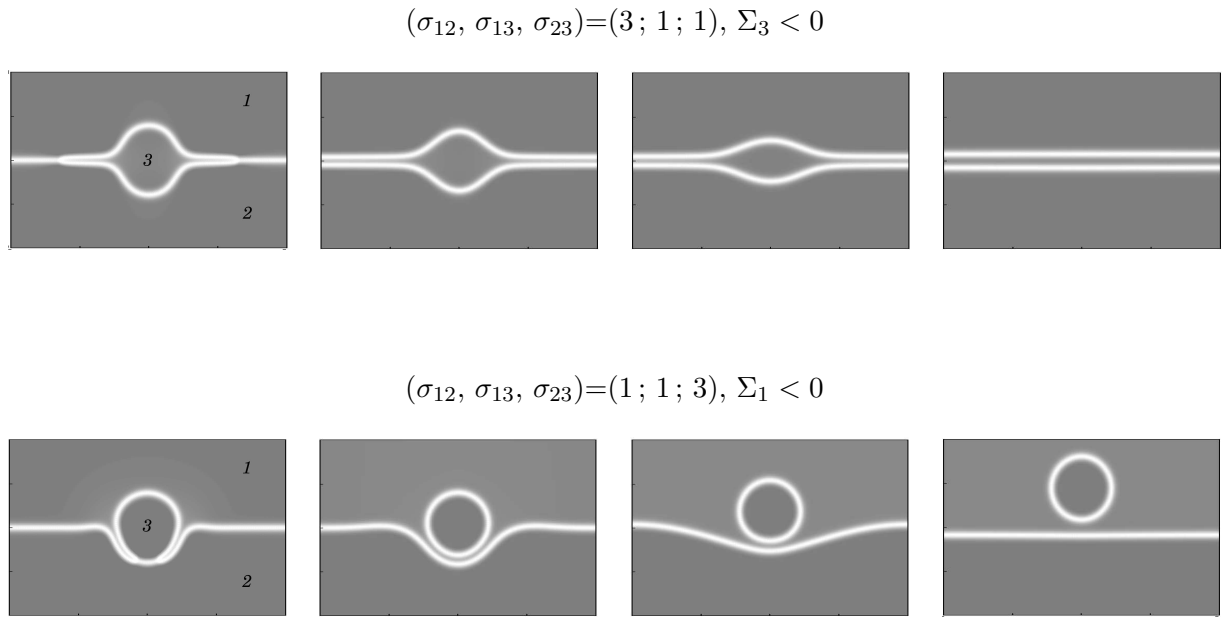


FIG. IV.17 – Evolution de la bulle en situation d'étalement total en utilisant $F = F_{\Lambda,0}$ avec $\Lambda = 7$

IV.3 Comportement d'une bulle dans un bain stratifié

On étudie ici la montée d'une bulle dans un bain composé de deux phases liquides stratifiées. Lorsque la bulle atteint l'interface, elle peut :

- soit rester piégée dans l'interface liquide/liquide ;
- soit pénétrer dans la phase légère.

Lors de son passage, elle peut entraîner dans son sillage de la phase lourde dans la phase légère (figure IV.18).

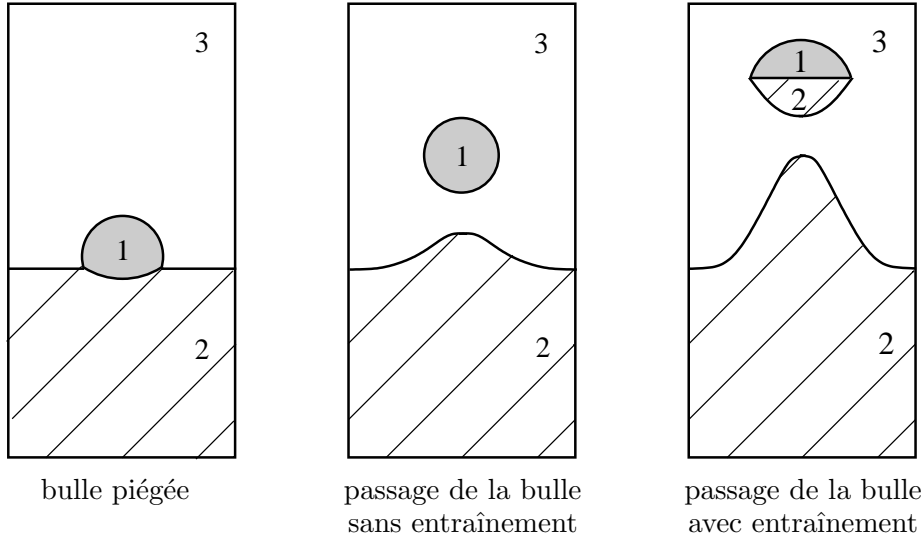


FIG. IV.18 – Différents comportements d'une bulle dans un bain stratifié

Greene *et al.* [50, 51] étudient expérimentalement ces différents comportements et proposent des critères sur le volume de la bulle pour prédire le passage de celle-ci ainsi que le phénomène d'entraînement. De plus, ils s'intéressent à la quantité de volume entraîné en fonction de différents paramètres (viscosités, masses volumiques).

Nous proposons ici d'étudier ces différentes situations. On se place dans un cas où il y a peu de déformation de la bulle afin de limiter les problèmes constatés précédemment comme l'épaississement de l'interface ou la diminution de la taille de la bulle (§III.1.5, §IV.1.1 et §IV.1.2). Les paramètres physiques sont détaillés dans le tableau IV.4 où l'indice 1 réfère à la bulle, l'indice 2 au fluide lourd et l'indice 3 au fluide léger. Tous les coefficients Σ_i sont positifs, nous prenons $F = F_0$ dans les équations de Cahn-Hilliard triphasiques.

TAB. IV.4 – Propriétés physiques

	ϱ (kg.m ⁻³)	η (Pa.s)	tensions de surface (N.m ⁻¹)	
bulle (c_1)	1	10^{-4}	bulle/liquide σ_{12}, σ_{13}	0.07
liquide lourd (c_2)	1200	0.15	liquide/liquide σ_{23}	0.05
liquide léger (c_3)	1000	0.1		

Le problème est résolu en géométrie 3D axisymétrique sur un domaine cylindrique de hauteur $20r_b$ et dont la base a un rayon de $2r_b$ où r_b est le rayon initial de la bulle (figure IV.19). Les

conditions au bord sont

$$\begin{aligned}
 \nabla c_i \cdot n &= 0 \text{ et } M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0, & \text{sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4, \\
 u \cdot n &= 0 \text{ et } (2\eta D(u)n - pn) \cdot t = 0, & \text{sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3, \\
 2\eta D(u)n - pn &= 0, & \text{sur } \Gamma_4.
 \end{aligned}$$

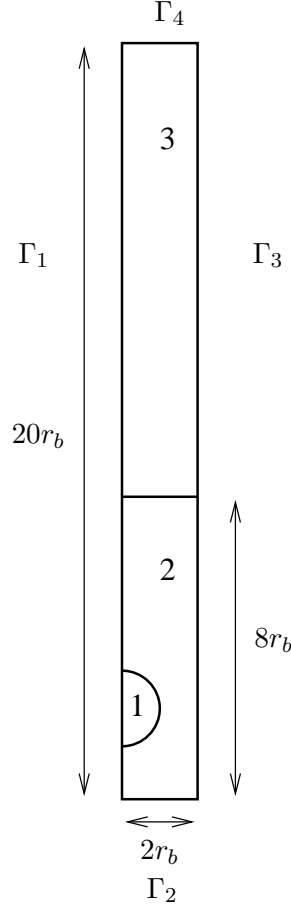


FIG. IV.19 – Domaine de calcul pour l'étude du comportement d'une bulle dans un bain stratifié

IV.3.1 Pénétration de la bulle dans la phase légère

Greene *al.* proposent un critère sur le volume de la bulle pour prédire son passage dans la phase légère où ils supposent qu'elle est soumise seulement à la force de flottabilité qui tend à la faire monter et à la force de tension de surface qui tend à la retenir dans l'interface ([50], annexe E). Les forces d'inertie et de viscosité sont négligées. Le critère prédit le passage de la bulle si son volume V est supérieur à

$$V_p = \left(\frac{2\pi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \sigma_{23}}{(\varrho_3 - \varrho_1)g} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Pour l'exemple choisi, le volume V_p vaut $8.87 \cdot 10^{-8} \text{ m}^3$ ce qui donne un rayon r_p égal à $2.76 \cdot 10^{-3} \text{ m}$. Nous obtenons que pour un rayon inférieur à r_p , la bulle reste piégée dans l'in-

terface liquide/liquide alors que pour un rayon supérieur à r_p la bulle pénètre dans la phase légère (figure IV.20).

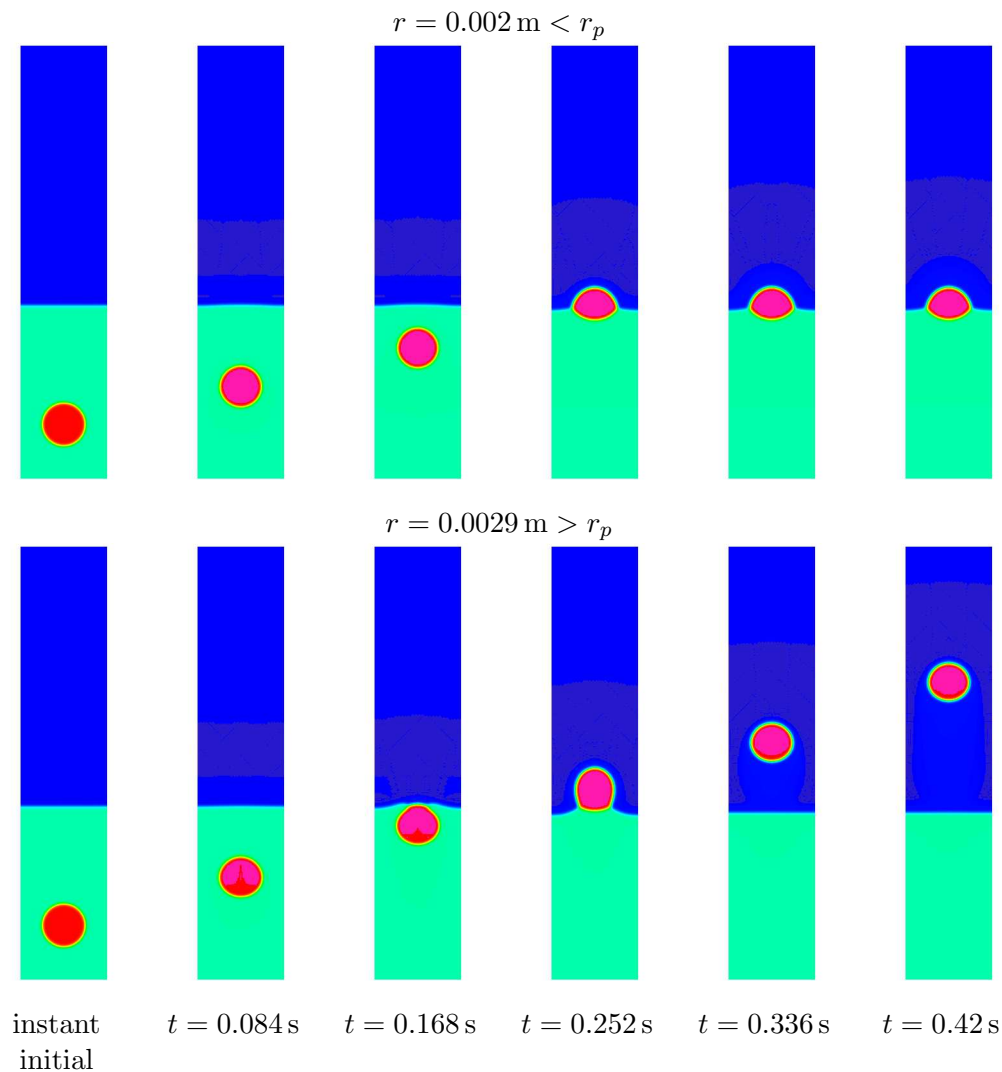


FIG. IV.20 – Ascension d'une bulle dans un bain stratifié pour $r = 0.002$ m et $r = 0.0029$ m

En faisant varier le rayon (tableau IV.5), nous trouvons qu'il existe un rayon critique numérique $r_p^{\text{num}} \simeq 0.0025$ à partir duquel la bulle traverse l'interface. On remarque qu'il est cohérent que ce rayon critique soit inférieur à r_p puisque le critère donné dans [50] sous-estime la force de flottabilité, surestime la force de tension de surface et néglige les effets hydrodynamiques.

TAB. IV.5 – Résultats obtenus pour le passage d'une bulle à travers une interface liquide/liquide pour différents rayons

rayon r_b (m)	0.002	0.0025	0.0026	0.0027	0.0028	0.0029
passage de la bulle	non	non	oui	oui	oui	oui

IV.3.2 Entraînement de la phase lourde dans la phase légère

Greene *et al.* [50] considèrent qu'il y a entraînement lorsque une quantité de phase lourde se détache lors du passage de la bulle et proposent un critère pour prédire ce phénomène. Comme précédemment, seules les forces de tension de surface et de flottabilité sont considérées et l'entraînement se produit (annexe E) si le volume V de la bulle est supérieur à

$$V_{e,S} = \left(\frac{2\pi\sigma_{23} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}} S}{g[\varrho_3 - \varrho_1 - \frac{S^{\frac{1}{3}}}{2}(\varrho_2 - \varrho_3)]} \right)^{\frac{3}{2}}$$

où S est une fonction qui représente le rapport entre le diamètre de la projection de la bulle sur la surface au repos et celui de la sphère de volume équivalent :

$S = 1$ pour une bulle sphérique,

$S > 1$ pour une bulle ayant la forme d'une calotte sphérique.

Pour notre application, en prenant $S = 1$, on obtient

$$V_{e,1} = \left(\frac{4\pi\sigma_{23} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}}}{g[3\varrho_3 - 2\varrho_1 - \varrho_2]} \right)^{\frac{3}{2}} = 1.04 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3$$

et $r_{e,1} = 2.91 \cdot 10^{-3} \text{ m}$. Dans le tableau IV.6, nous répertorions les résultats obtenus pour différents rayons. Nous trouvons qu'il y a entraînement pour des rayons supérieurs à $r_{e,1}^{\text{num}} = 0.006 \text{ m}$ ce qui est nettement supérieur à la valeur prédite. Cet écart est probablement dû en partie au fait que le critère néglige certaines forces notamment les forces visqueuses qui sont importantes dans cette étude. Expérimentalement, Greene *et al.* observent pour certains couples de liquides un volume critique inférieur à celui du critère mais les écarts restent moins importants que celui obtenu ici numériquement.

Nous remarquons aussi que la mobilité influe sur l'entraînement. En effet, en diminuant le coefficient M_0 , on trouve $r_{e,1}^{\text{num}} = 0.005 \text{ m}$ (tableau IV.7). Il y a entraînement pour des plus petits rayons mais on constate un épaississement irrégulier de l'interface entre la bulle et les liquides. Lorsque la mobilité est importante, il y a moins de déformations des interfaces ce qui est pénalisant pour le phénomène d'entraînement.

TAB. IV.6 – Résultats obtenus pour l'entraînement de la phase lourde lors du passage de la bulle pour différents rayons avec $M_0(\mathbf{c}) = 1.1 \cdot 10^{-5}(1 - c_1)^2(1 - c_2)^2(1 - c_3)^2$

rayon r_b (m)	0.003	0.004	0.005	0.006
entraînement	non	non	non	oui

TAB. IV.7 – Résultats obtenus pour l'entraînement de la phase lourde lors du passage de la bulle pour différents rayons avec $M_0(\mathbf{c}) = 1.1 \cdot 10^{-7}(1 - c_1)^2(1 - c_2)^2(1 - c_3)^2$

rayon r_b (m)	0.003	0.004	0.005	0.006
entraînement	non	non	oui	oui

IV.3.3 Quantité de fluide lourd entraîné

Greene *et al.* [51] étudient expérimentalement la quantité de fluide lourd entraîné en fonction des paramètres physiques comme les masses volumiques et les viscosités. Ils comparent pour différents liquides la quantité de volume entraîné pour des bulles de tailles différentes.

On propose de retrouver qualitativement les comportements observés dans [51]. Pour cela, on définit le volume entraîné par la quantité de fluide lourd (représenté par c_2) passant au dessus de la hauteur de l'interface liquide/liquide initiale, calculé par

$$V_e = \int_{\{z > z_h\}} c_2 dx$$

où z_h désigne la hauteur de l'interface initiale (dans notre cas $z_h = 8r_b$). On s'intéressera à l'évolution de V_e au cours du temps pour différents paramètres physiques.

Nous nous plaçons, tout d'abord, dans des conditions d'entraînement en prenant $r_b = 0.008$ m et les mêmes propriétés que précédemment (tableau IV.4). Ce calcul servira de point de comparaison pour la suite.

Nous visualisons sur la figure IV.21, le passage de la bulle à travers l'interface liquide/liquide et l'évolution du volume entraîné. A $t = 0$, le volume entraîné n'est pas nul car nous calculons le volume à partir du milieu de l'interface diffuse. On remarque une première augmentation de V_e correspondant à l'arrivée de la bulle à l'interface, suivie d'une diminution traduisant le passage de celle-ci. Lorsque la bulle monte dans le fluide léger, elle amène dans son sillage une colonne de fluide lourd, on observe alors une forte augmentation de V_e . Une partie du fluide entraîné retombe (V_e diminue) et la colonne devient moins large. Lorsqu'il y a détachement de la colonne du fluide lourd, on obtient alors un plateau dans l'évolution de V_e et des gouttelettes de fluide lourd se forment dans le fluide léger. On constate que les petites gouttes "disparaissent" dans le sens où elles sont absorbées par le fluide lourd. Ce phénomène a déjà été observé, notamment dans [73], figure 5.6. où une grande bulle "absorbe" une petite. Ce comportement est lié aux équations de Cahn-Hilliard pures où les paramètres d'ordre évoluent de manière à minimiser l'énergie. Si un système est composé d'une grande et d'une petite bulle alors il va évoluer vers un système composé d'une seule bulle plus grosse, d'énergie plus faible. La grande bulle a "absorbé" la petite par diffusion. Enfin, on note une diminution de V_e due à la sortie de la bulle en dehors du domaine et à la retombée des gouttes de fluide lourd.

A $t = 1$ s, le volume V_e devrait être inférieur au volume initial puisque l'interface liquide/liquide est plus basse (volume de la bulle en moins), or il est nettement supérieur à celui-ci. Sur la figure IV.22, on remarque que le paramètre d'ordre c_2 (fluide lourd) n'est pas nul dans la phase légère. Cette quantité de fluide lourd vient de l'absorption des gouttelettes qui n'est pas total et de l'influence des mouvements convectifs sur la partie de fluide lourd transporté par la bulle comme observé lors de l'étude des montées de bulle (§III.1.5 et §IV.1.1).

On s'intéresse maintenant à l'influence des masses volumiques et des viscosités sur la quantité de volume entraîné.

Nous faisons varier la masse volumique du fluide lourd $\varrho_2 = 1100, 1200, 1300 \text{ kg.m}^{-3}$. Sur la figure IV.23, nous observons que plus la masse volumique du fluide lourd est importante, moins il y a de volume entraîné par la bulle. Lorsque ϱ_2 est grand, il n'y a pas d'entraînement.

Lorsque nous faisons varier la masse volumique du fluide léger $\varrho_3 = 900, 1000, 1100 \text{ kg.m}^{-3}$, nous observons le phénomène contraire, plus ϱ_3 augmente, plus il y a de volume entraîné (figure IV.24). Si ϱ_3 est faible, il n'y a pas d'entraînement.

Les viscosités du fluide lourd et léger influent de la même manière sur la quantité de volume entraîné. Plus les viscosités augmentent, moins il y a de volume entraîné. Lorsqu'on fait varier la viscosité du fluide lourd $\eta_2 = 0.1, 0.15, 0.2 \text{ Pa.s}$, on retrouve ce comportement. On note qu'il y a

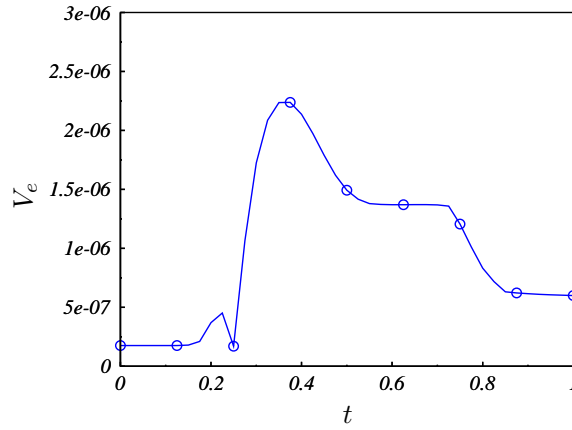
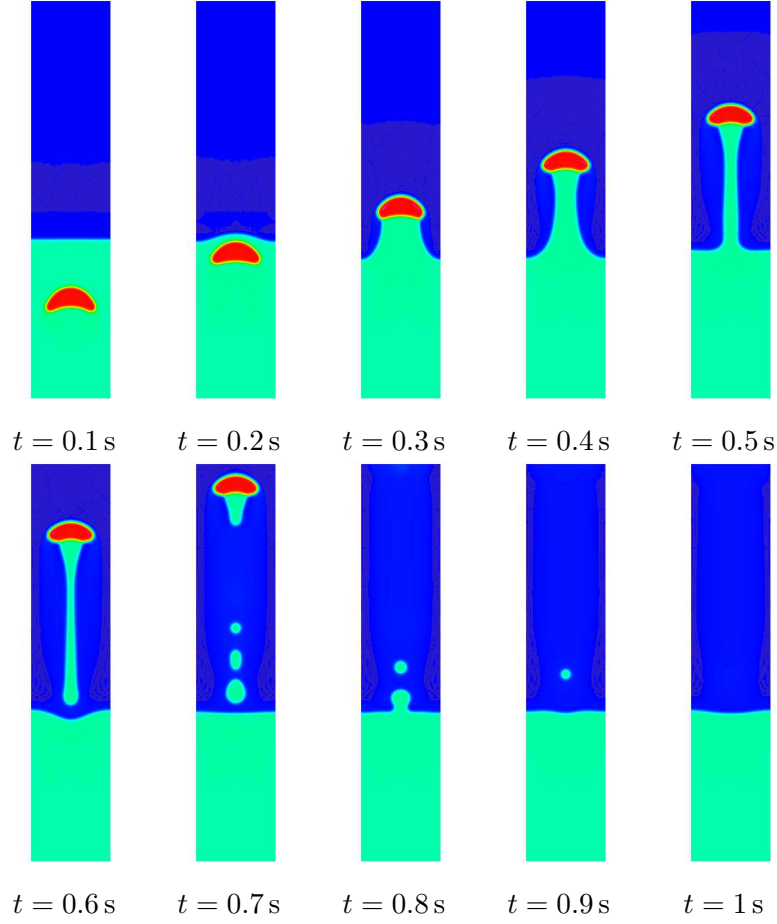
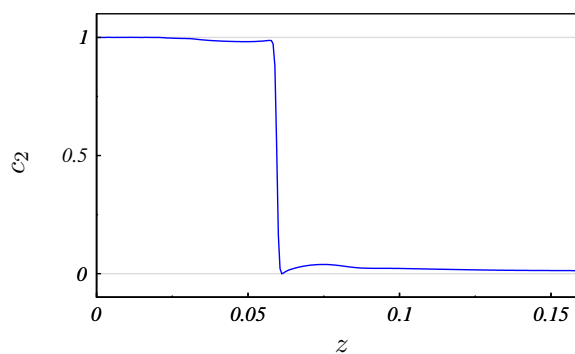
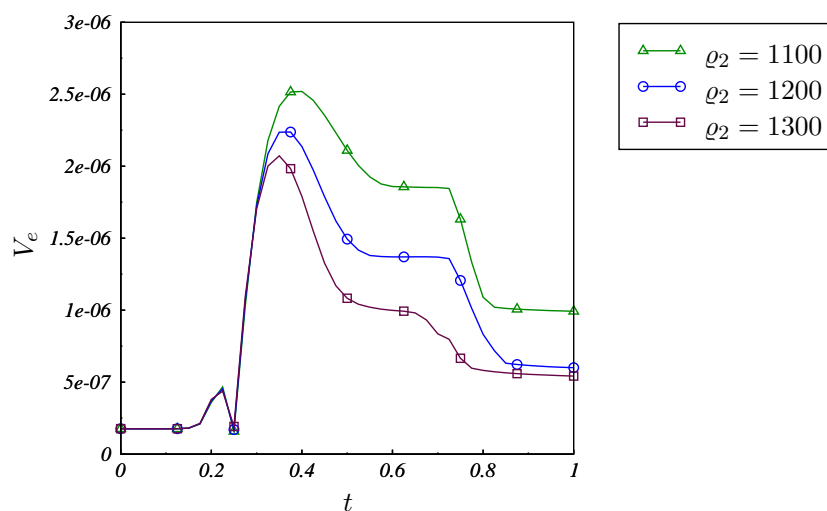
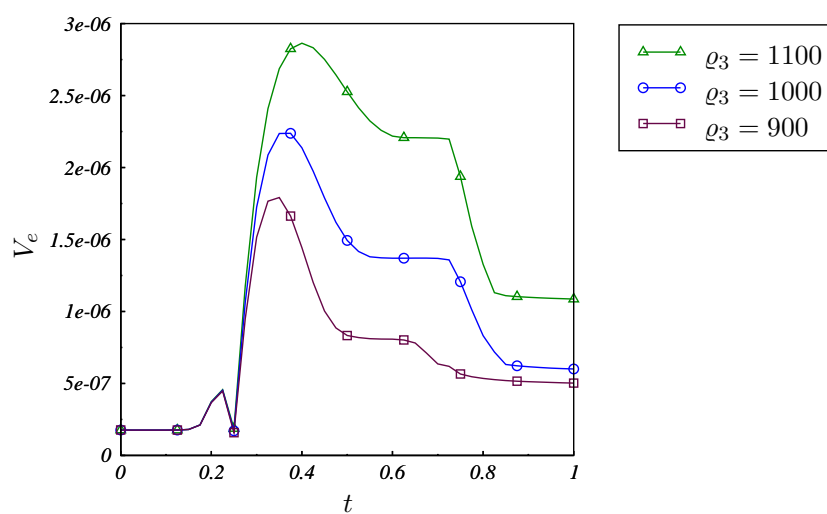


FIG. IV.21 – Entraînement de la phase lourde dans la phase légère par le passage de la bulle et évolution en temps de la quantité de volume entraîné

peu d'écart sur la quantité de volume entraîné entre les trois cas (figure IV.25). Enfin, lorsqu'on prend des viscosités différentes pour le fluide léger $\eta_3 = 0.01, 0.1, 0.2$ Pa.s, on obtient bien une augmentation du volume entraîné avec la diminution de η_3 . Pour $\eta_3 = 0.2$ Pa.s il y a très peu d'entraînement.

Tous ces résultats sont en accord avec les résultats expérimentaux présentés dans [51].


 FIG. IV.22 – Vue en coupe de c_2 (fluide lourd) en $r = 0$ à $t = 1$ s

 FIG. IV.23 – Evolution du volume entraîné de la phase lourde dans la phase légère pour différentes masses volumiques du fluide lourd : $\rho_2 = 1100, 1200, 1300 \text{ kg.m}^{-3}$

 FIG. IV.24 – Evolution du volume entraîné de la phase lourde dans la phase légère pour différentes masses volumiques du fluide léger : $\rho_3 = 900, 1000, 1100 \text{ kg.m}^{-3}$

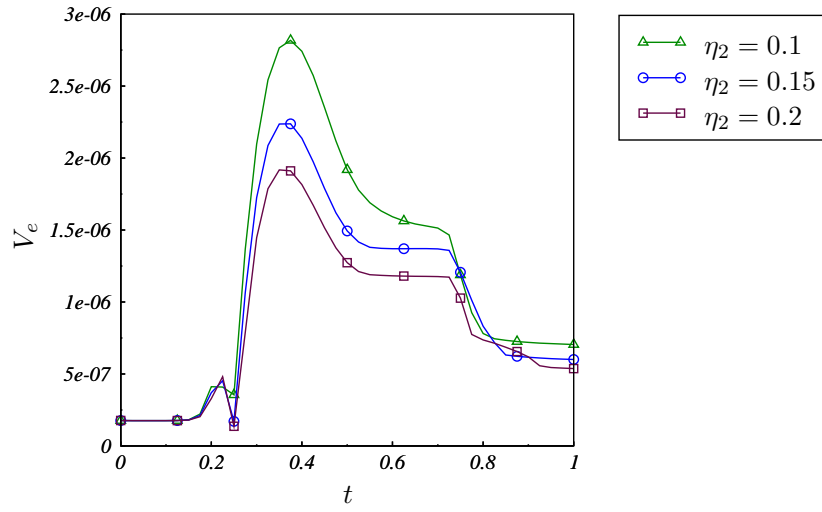


FIG. IV.25 – Evolution du volume entraîné de la phase lourde dans la phase légère pour différentes viscosités du fluide lourd : $\eta_2 = 0.1, 0.15, 0.2$ Pa.s

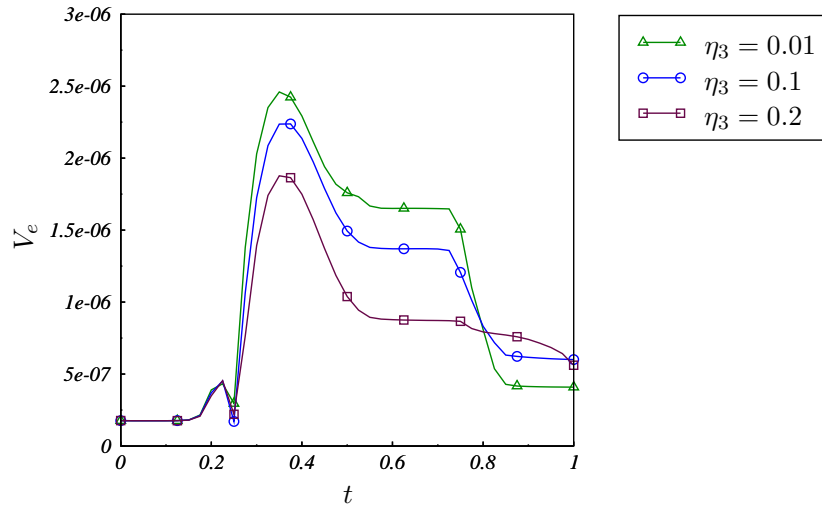


FIG. IV.26 – Evolution du volume entraîné de la phase lourde dans la phase légère pour différentes viscosités du fluide léger : $\eta_3 = 0.01, 0.1, 0.2$ Pa.s

IV.4 Transferts de chaleur

On étudie dans ce paragraphe des écoulements anisothermes. On s'intéresse aux transferts de chaleur entre deux phases stratifiées traversées par une bulle et par un train de bulles. Les paramètres physiques sont donnés dans le tableau IV.8, ce sont les mêmes que dans le paragraphe précédent.

TAB. IV.8 – Propriétés physiques considérées

	ϱ (kg.m ⁻³)	η (Pa.s)	λ (W.K ⁻¹ .m ⁻¹)	c_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
bulle (c_1)	1	10 ⁻⁴	0.29	2800
liquide lourd (c_2)	1200	0.15	30	600
liquide léger (c_3)	1000	0.1	3	600

tensions de surface (N.m ⁻¹)	
bulle/liquide σ_{12}, σ_{13}	0.07
liquide/liquide σ_{23}	0.05

Nous prenons une conductivité thermique élevée dans le fluide lourd et les chaleurs massiques sont identiques dans les deux liquides. Les propriétés thermiques de la bulle sont celles de la vapeur d'eau à 2000K. Ces conductivités et ces chaleurs massiques correspondent à celles des phases oxydes et métalliques du corium dans le cas réacteur.

Le problème est résolu en géométrie 3D axisymétrique sur un domaine cylindrique de hauteur $20r_b$ et dont la base a un rayon de $2r_b$ où r_b désigne le rayon de la bulle à l'instant initial. On impose la température à 1800K sur Γ_2 et à 2000K sur Γ_4 (figure IV.27). Nous choisissons d'imposer la direction du flux en affectant la température chaude (resp. froide) à la frontière supérieure (resp. inférieure) du domaine de calcul ce qui est cohérent avec le cas réacteur où la puissance est générée principalement dans la phase légère. Pour le passage d'une bulle, les conditions au bord sont

$$\begin{aligned}
& \nabla c_i \cdot n = 0 \text{ et } M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0, & \text{sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4, \\
& u \cdot n = 0 \text{ et } (2\eta D(u)n - pn) \cdot t = 0, & \text{sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3, \\
& 2\eta D(u)n - pn = 0, & \text{sur } \Gamma_4, \\
& \nabla T \cdot n = 0 & \text{sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_3, \\
& T = 1800\text{K} & \text{sur } \Gamma_2, \\
& T = 2000\text{K} & \text{sur } \Gamma_4.
\end{aligned}$$

Pour le passage du train de bulles, les conditions changent sur Γ_2 pour la vitesse et les paramètres d'ordre où on impose des conditions de Dirichlet (§IV.4.2).

Pour initialiser le champ de température, on prend la solution d'équilibre d'un problème de conduction pure, où les interfaces sont fixes (résolution seulement d'une équation de diffusion vérifiée par $T, \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = 0$).

Dans cette étude, on s'intéresse en particulier au flux thermique à travers les interfaces défini pour une interface I_{ij} , par

$$\phi_T = - \int_{I_{ij}} \lambda_i \nabla T \cdot n_{ij} ds = - \int_{I_{ij}} \lambda_j \nabla T \cdot n_{ji} ds.$$

Comme dans notre modèle, l'interface est épaissie, nous allons approcher le flux par une intégrale volumique en utilisant la définition des paramètres d'ordre. On définit le flux thermique approché,

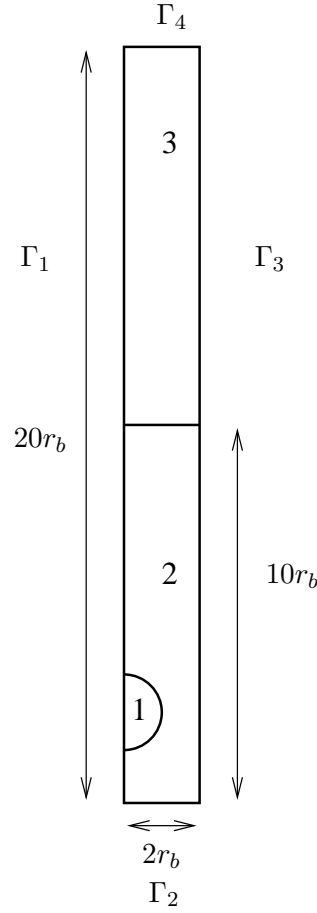


FIG. IV.27 – Domaine de calcul pour l'étude des transferts de chaleur

à travers les interfaces entre une phase i et les deux autres phases par

$$\phi_T(c_i) = - \int_{\Omega} \lambda(\mathbf{c}) \nabla T \cdot \nabla c_i \, dx.$$

On propose de justifier cette définition par un calcul formel. Introduisons $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$I_i = \{X \in \mathbb{R}^d \mid f(X) = 0\}$$

et $|\nabla f| \neq 0$ ne s'annule pas sur I . Pour une fonction régulière H , on a

$$\int_{I_i} H \, ds = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} \delta_{\varepsilon}(d(X, I)) H(X) \, dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} |\nabla f(X)| \delta_{\varepsilon}(f(X)) H(X) \, dx$$

où δ_{ε} est une approximation de l'unité et d est la fonction distance. Ainsi en utilisant que $n = \frac{\nabla f}{|\nabla f|}$ il vient

$$\begin{aligned} \int_I \nabla T \cdot n \, ds &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} |\nabla f| \delta_{\varepsilon}(f(X)) \nabla T \cdot \frac{\nabla f}{|\nabla f|} \, dx \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} \nabla T \cdot \nabla f \delta_{\varepsilon}(f(X)) \, dx. \end{aligned}$$

Formellement, on peut choisir δ_{ε} de sorte que

$$\nabla c_i = \nabla f \delta_{\varepsilon}(f).$$

En effet, intuitivement c_i se comporte comme $\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{2f(X)}{\varepsilon}\right)$, et on a

$$\nabla c_i = \frac{1}{\varepsilon} \left(1 - \tanh^2\left(\frac{2f(X)}{\varepsilon}\right)\right) \nabla f.$$

La fonction $\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon} \left(1 - \tanh^2\left(\frac{2x}{\varepsilon}\right)\right)$ joue alors le rôle d'approximation de l'unité même si elle n'est pas à support compact.

Pour cette étude, on s'intéresse en particulier au flux thermique à travers les interfaces de la phase lourde, calculé par

$$\phi_T(c_2) = - \int_{\Omega} \lambda(\mathbf{c}) \nabla T \cdot \nabla c_2 \, dx.$$

IV.4.1 Passage d'une bulle à travers une interface liquide/liquide

On considère ici le passage d'une bulle à travers l'interface liquide/liquide. Nous comparons le flux thermique $\phi_T(c_2)$ pour les situations avec ou sans entraînement de la phase lourde dans la phase légère. On s'intéresse plus particulièrement au rapport $R(c_2)$ du flux $\phi_T(c_2)$ sur le flux initial $\phi_T^0(c_2)$

$$R(c_2) = \frac{\phi_T(c_2)}{\phi_T^0(c_2)}.$$

Par rapport aux résultats obtenus dans le paragraphe précédent, nous prenons $r_b = 0.004 \, \text{m}$ pour le cas sans entraînement et $r_b = 0.008 \, \text{m}$ pour celui avec entraînement.

Sur la figure IV.28, nous remarquons que dans la situation avec entraînement, le flux augmente très nettement (un facteur 10) alors que pour $r_b = 0.004 \, \text{m}$, il y a seulement un facteur 1.5. En effet, dans le premier cas, la taille de l'interface entre les deux liquides augmentent (figure IV.29), il y a donc plus de zones d'échange entre les deux fluides.

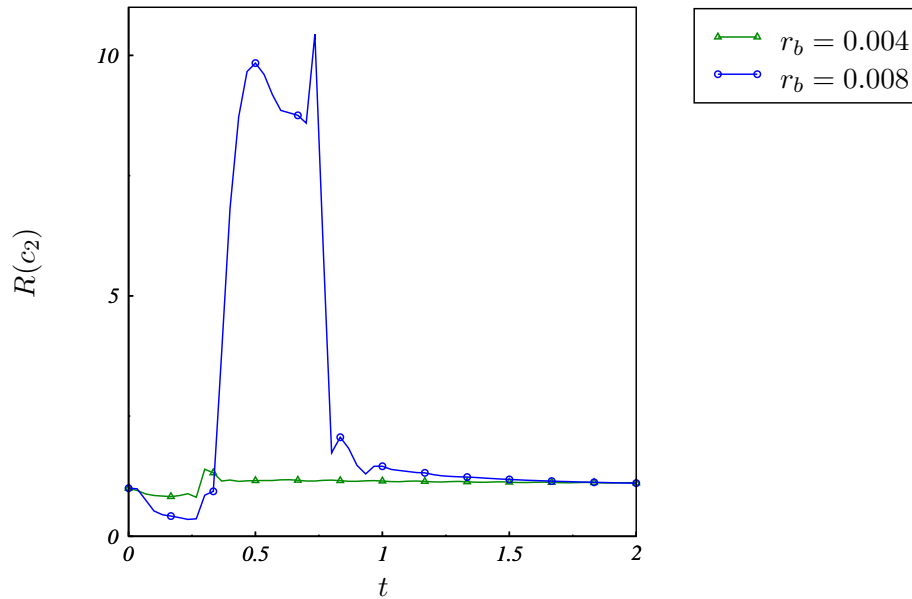


FIG. IV.28 – Evolution du rapport $R(c_2)$ pour deux tailles de bulles différentes

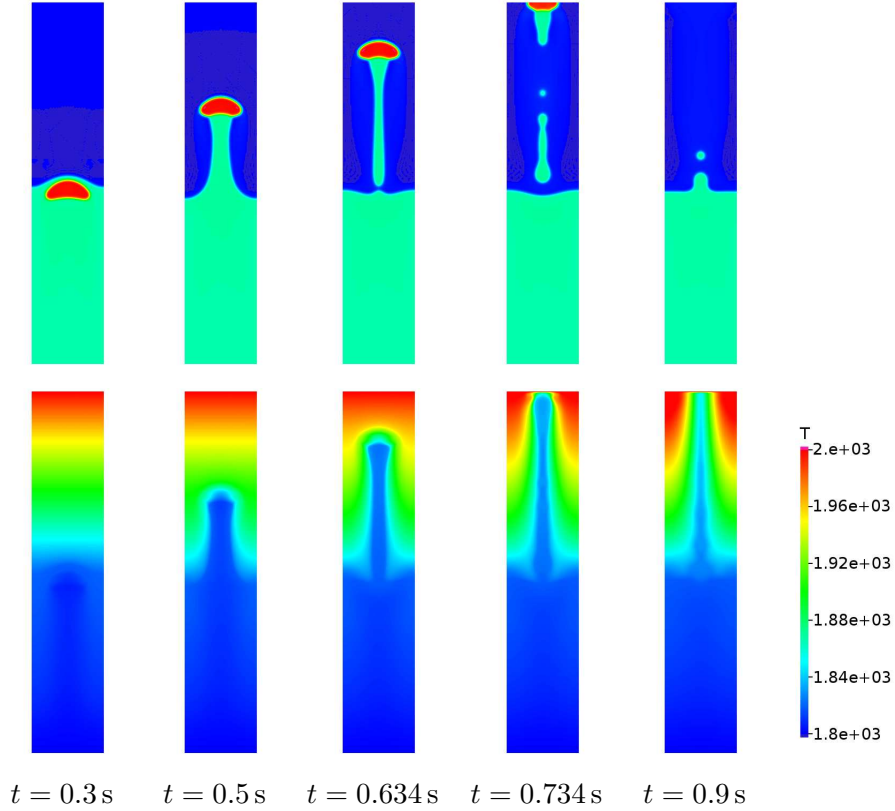


FIG. IV.29 – Passage d’une bulle à travers une interface liquide/liquide et évolution du champ de température pour $r_b = 0.008 \text{ m}$

Dans les deux cas, lorsque la bulle monte dans le fluide lourd avant la déformation de l’interface liquide/liquide, le rapport des flux $R(c_2)$ diminue. Le fluide lourd perd de l’énergie en chauffant la bulle qui se déplace dans une zone plus chaude que sa température initiale.

Pour $r_b = 0.008 \text{ m}$, on note ensuite une forte augmentation de $R(c_2)$ lorsque la bulle entraîne de la phase lourde dans la phase légère (la température du fluide léger est plus élevée que celle du fluide lourd). Une deuxième augmentation de flux est observée lorsque la bulle sort du domaine. Les échanges entre le gaz et la phase lourde deviennent alors plus importants du fait que la température en haut du domaine est imposée. Pour $r_b = 0.004 \text{ m}$, l’interface entre les deux liquides se déforment très peu, il y a alors peu de variation de $R(c_2)$.

On compare ensuite sur la figure IV.30 le champ de température lorsque la bulle est en haut du domaine pour $r_b = 0.004 \text{ m}$ et $r_b = 0.008 \text{ m}$. On remarque que la température dans la partie supérieure (au dessus de l’interface liquide/liquide initiale) est plus faible lorsqu’il y a eu un entraînement que pour $r_b = 0.004 \text{ m}$.

En conclusion, les résultats obtenus sont très différents entre les situations avec ou sans entraînement de la phase lourde. Les transferts thermiques entre les phases sont beaucoup plus importants dans le premier cas.

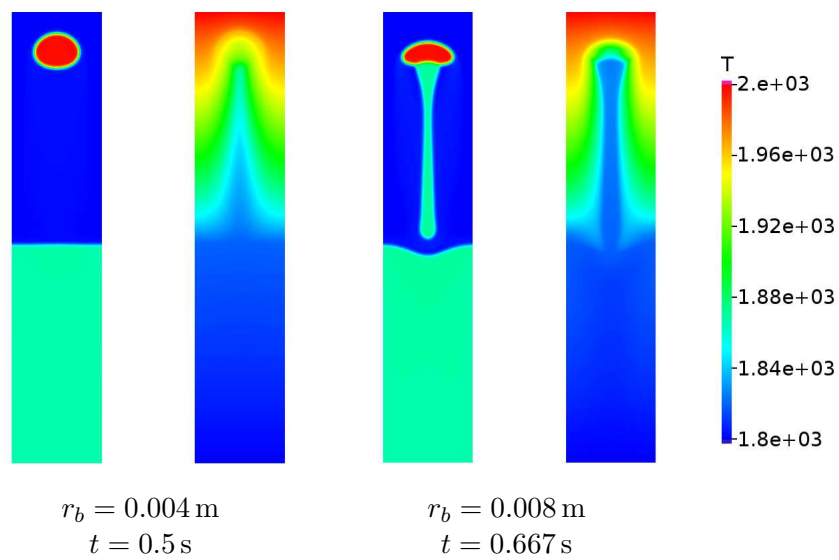


FIG. IV.30 – Champ de température et position des interfaces pour $r_b = 0.004$ m à $t = 0.5$ s (sans entraînement) et pour $r_b = 0.008$ m à $t = 0.667$ s (avec entraînement)

IV.4.2 Passage d'un train de bulles à travers une interface liquide/liquide

On s'intéresse maintenant à la variation du flux thermique à travers l'interface entre les deux phases stratifiées lors du passage d'un train de bulles.

Pour la mise en place de ce train de bulles, on impose une condition de Dirichlet sur le bord Γ_2 qui ne dépend pas du temps

$$c_1 = c_{1D}, \quad c_2 = 1 - c_1, \quad c_3 = 0.$$

De plus, on impose $u = u_e$, une vitesse entrante, sur Γ_D où c_1 vaut 1 (figure IV.31). Le rayon de la bulle initiale vaut $r_b = 0.004$ m et celui de la section d'injection, $r_j = 0.0018$ m.

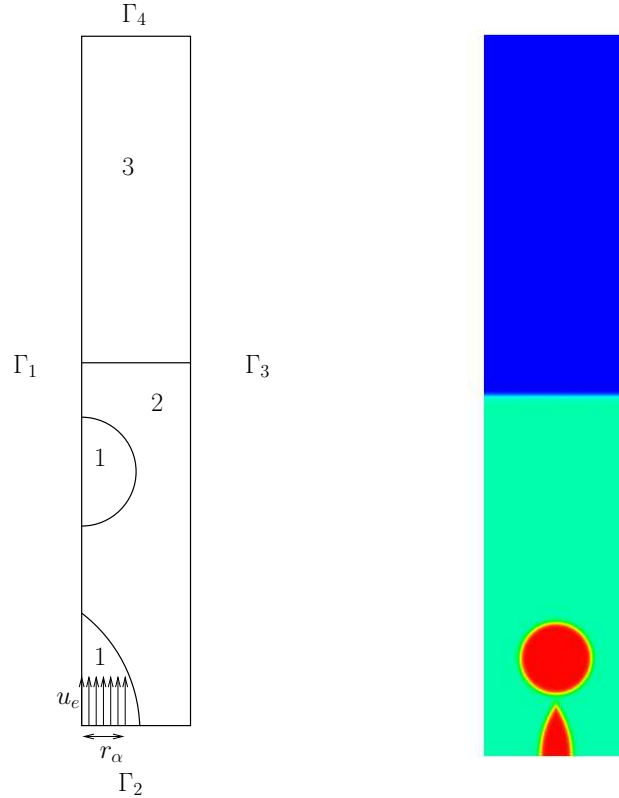


FIG. IV.31 – Domaine de calcul et configuration initiale pour le passage d'un train de bulles à travers une interface liquide/liquide

On prend les conditions au bord suivantes

– sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$

$$M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot \mathbf{n} = \nabla c_i \cdot \mathbf{n} = 0, \quad u \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{et} \quad (-pn + 2\eta D(u)n) \cdot \mathbf{t} = 0, \quad (\text{IV.2})$$

– sur Γ_4

$$M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot \mathbf{n} = \nabla c_i \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{et} \quad -pn + 2\eta D(u)n = 0, \quad (\text{IV.3})$$

– sur Γ_2

$$M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot \mathbf{n} = 0, \quad c_1 = c_{1D}, \quad c_2 = c_{2D} = 1 - c_{1D}, \quad c_3 = 0 \quad \text{et} \quad u = \begin{cases} u_e & \text{si } r < r_\alpha, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{IV.4})$$

avec $c_{1D} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{(r + 0.0082)^2 + z^2} - 0.01) \right)$, $r_\alpha = 1.2 \cdot 10^{-3}$ et $u_e = (0, 0.4)$.

Sous ces conditions, nous observons le détachement des bulles (figure IV.32). On s'est placé dans un cas sans entraînement de la phase lourde dans la phase légère.

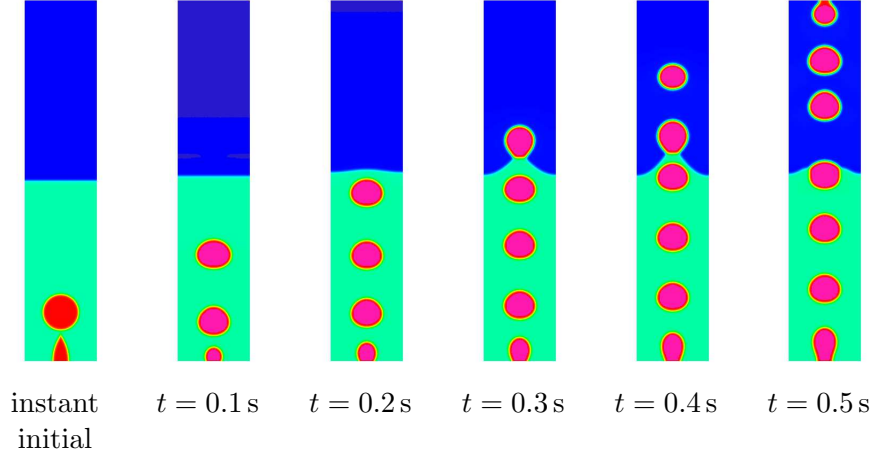


FIG. IV.32 – Evolution d'un train de bulles

Comme dans le paragraphe précédent, on s'intéresse au rapport du flux à travers les interfaces associées à la phase lourde sur le flux initial. On observe sur la figure IV.33 que $R(c_2)$ oscille avec une allure générale croissante. Les oscillations correspondent aux passages des bulles à travers l'interface liquide/liquide. En effet, lors de l'arrivée de la bulle, l'interface se déforme ce qui augmente $R(c_2)$ puis lorsque la bulle traverse l'interface, celle-ci devient plane et plus petite puisque une partie de l'interface liquide/liquide est remplacée par des interfaces gaz/liquide, il y a alors diminution de $R(c_2)$.

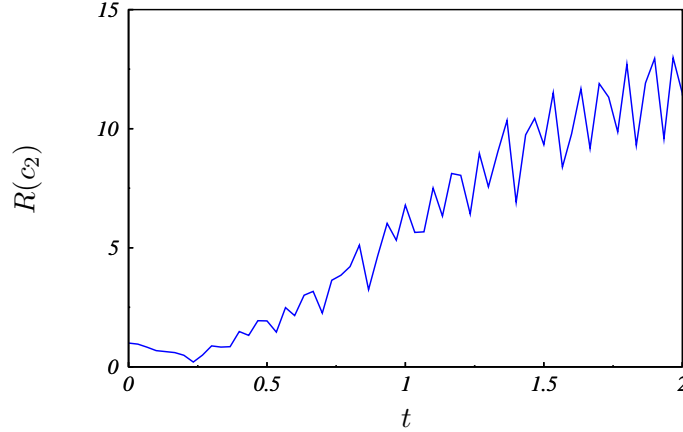


FIG. IV.33 – Evolution du rapport $R(c_2)$ lors du passage du train de bulles

Afin d'étudier l'influence du train de bulles, on propose de calculer des moyennes en temps et en espace sur des sections du domaine, notées A_z , en fonction de la hauteur (figure IV.34). On s'intéresse à la quantité

$$T_m(t, z) = \frac{\int_0^t \int_{A_z} \varrho(\mathbf{c}) c_p(\mathbf{c}) T \, dx d\tau}{\int_0^t \int_{A_z} \varrho(\mathbf{c}) c_p(\mathbf{c}) \, dx d\tau}$$

qui représente la "température moyenne" par section.

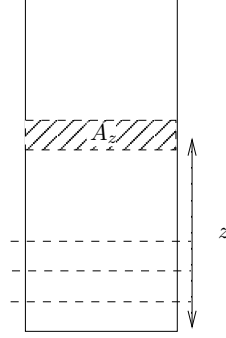


FIG. IV.34 – Découpage par tranche du domaine en fonction de la hauteur

On divise le domaine en 100 sections et à différents instants, on visualise sur la figure IV.36 la quantité T_m en fonction de la hauteur (on associe la valeur T_m d'une section à la hauteur du milieu de celle-ci). A $t = 0$, on a le profil de température d'un problème de conduction pure. On remarque ensuite que T_m augmente par le passage des bulles dans une zone où z est compris entre 0.04 et 0.06, qui se situe au dessus de la position initiale de l'interface liquide/liquide. Cette zone semble s'étendre avec le temps.

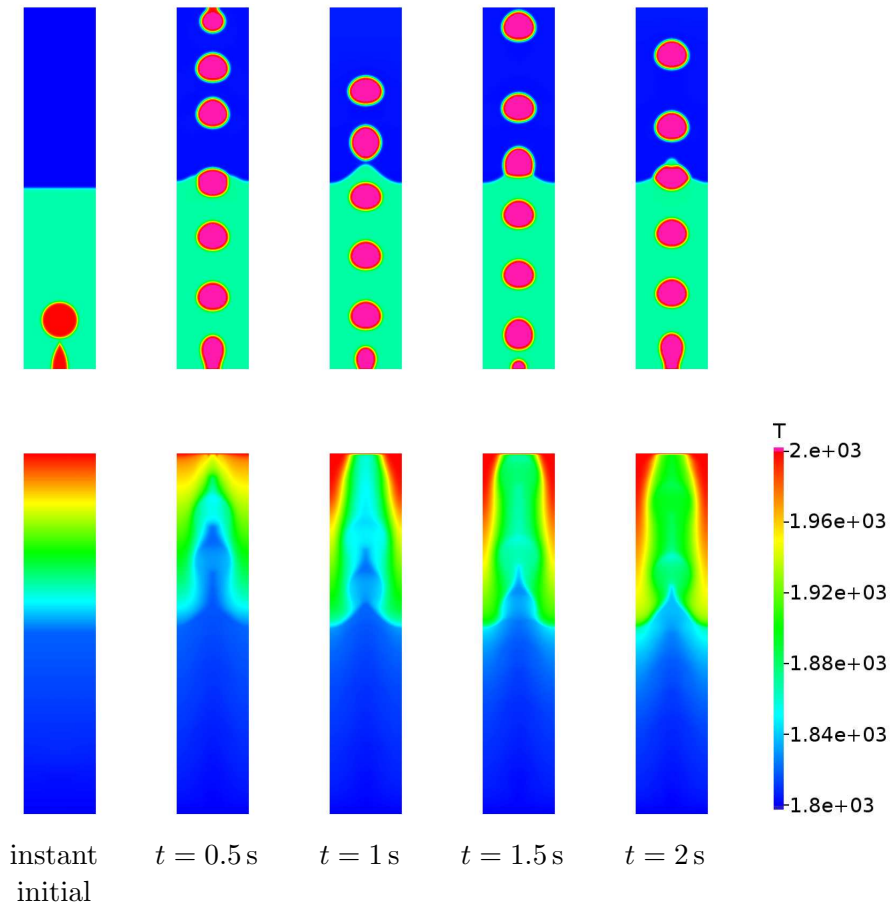
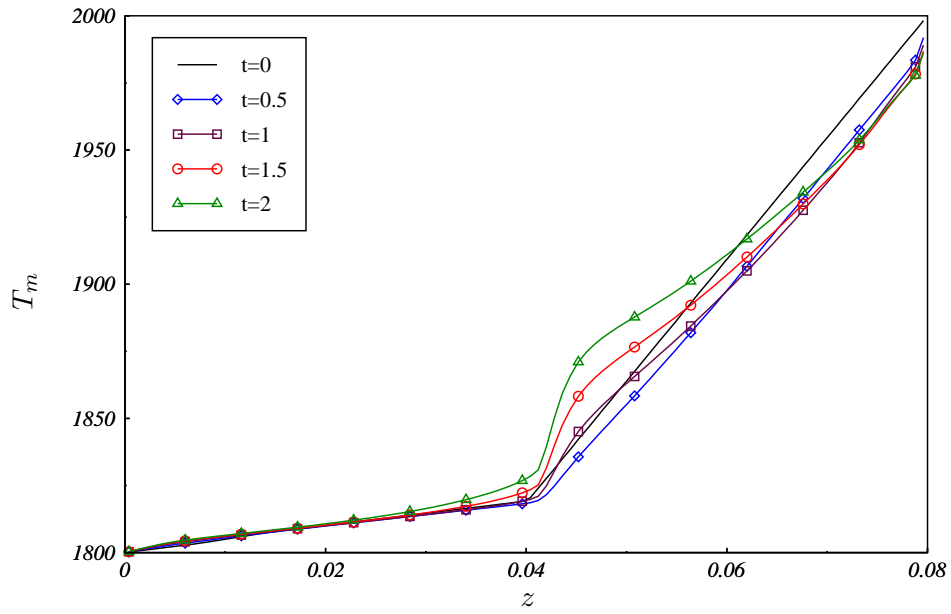


FIG. IV.35 – Evolution des interfaces et du champ de température lors du passage d'un train de bulles à travers une interface liquide/liquide

FIG. IV.36 – Visualisation de T_m en fonction de z à différents instants

Afin de déterminer par la suite des coefficients d'échange pour des modèles simplifiés, il faudrait faire des études sur des temps plus longs et faire varier les conditions au bord pour la température (par exemple imposer le flux thermique en haut du domaine).

IV.5 Limites : interaction corium/béton

Le modèle a donné des résultats satisfaisants sur les études précédentes : montée de bulle, lentille piégée, ascension d'une bulle dans un bain stratifié. Le paragraphe précédent a permis de mettre en place des outils pour l'étude des transferts de chaleur lors du passage d'un train de bulles. Le but, maintenant, est de reprendre ces études pour des propriétés physiques du corium afin d'évaluer ensuite des coefficients d'échange et appuyer un choix de corrélation pour les codes d'interaction corium/béton à une échelle plus grande.

On rappelle que l'étude porte sur une configuration où le corium est composé de deux phases stratifiées, une phase oxyde et une phase métallique, traversées par un écoulement à bulles. On considère que le gaz induit par la dégradation du béton est essentiellement de la vapeur d'eau. Les propriétés physiques de la phase oxyde évoluent durant l'accident à cause de la dégradation du béton [29]. Les propriétés thermophysiques des phases sont données dans [6]. On se place dans la situation où la phase oxyde est plus légère que la phase métallique et sa viscosité est plus importante. Nous prenons les propriétés physiques répertoriées dans le tableau IV.9 pour les trois phases. L'indice 1 réfère au gaz, l'indice 2 à la phase métallique et l'indice 3 à celle oxyde.

TAB. IV.9 – Propriétés physiques du corium et de la vapeur d'eau

	ρ (kg.m ⁻³)	η (Pa.s)	λ (W.K ⁻¹ .m ⁻¹)	c_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
gaz (c_1)	0.1	$7.3 \cdot 10^{-5}$	0.29	2800
métal (c_2)	7800	0.001	30	600
oxyde (c_3)	4000	0.1	3	600

tensions de surface (N.m ⁻¹)	
gaz/métal σ_{12}	1.3
gaz/oxyde σ_{13}	0.8
oxyde/métal σ_{23}	1

Les écoulements étudiés sont très différents des précédents. Il y a des écarts de masses volumiques élevés, les tensions de surface sont importantes et la viscosité dans la phase métallique est faible. On remarque dans le tableau IV.10 que pour le couple gaz/métal, le nombre de Morton est très faible $\mathbf{M} = 5.7 \cdot 10^{-16}$. A notre connaissance, il n'y a ni expériences, ni simulations de montée de bulle pour un tel régime.

Numériquement, nous observons des instabilités pour le champ de vitesse (vitesse très importante dans certaines parties de la bulle) qui finissent par détruire les interfaces. Des problèmes numériques pour la vitesse ont été mentionnés lorsque les tensions de surface sont importantes pour d'autres modèles multiphasiques. Scardovelli et Zaleski [90] remarquent que pour des nombres de Laplace supérieurs à 10^6 , celui-ci étant défini par $\mathbf{La} = \frac{\sigma \rho_\ell d_b}{\eta_\ell^2}$, les simulations numériques deviennent difficiles à cause de courants parasites. Dans le cas gaz/métal, le nombre de Laplace varie entre $6.1 \cdot 10^7$ et $2.2 \cdot 10^8$ pour un diamètre de bulle compris entre 0.006 m et 0.022 m (tailles de bulle étudiées dans la suite). Dans le cas gaz/oxyde, la phase oxyde étant beaucoup plus visqueuse que le métal, la bulle est dans le régime "Ellipsoïdal" du diagramme IV.1 de Clift *et al.* et le nombre de Laplace est compris entre $1.9 \cdot 10^4$ et $7 \cdot 10^4$ pour les diamètres considérés précédemment (tableau IV.10). La simulation d'une bulle dans la phase oxyde pose moins de difficultés que dans la phase métallique.

Afin de s'affranchir de ces problèmes numériques, nous avons augmenté de façon artificielle

TAB. IV.10 – Nombres adimensionnels dans le cas d’une bulle de vapeur d’eau dans du corium pour les propriétés du tableau IV.9

	d_b (m)	M	Eo	La
gaz/métal	0.006	$5.7 \cdot 10^{-16}$	2.1	$6.1 \cdot 10^7$
	0.008		3.8	$8.1 \cdot 10^7$
	0.012		8.5	$1.2 \cdot 10^8$
	0.022		28.5	$2.2 \cdot 10^8$
gaz/oxyde	0.006	$4.8 \cdot 10^{-7}$	1.8	$1.9 \cdot 10^4$
	0.008		3.1	$2.6 \cdot 10^4$
	0.012		7.1	$3.8 \cdot 10^4$
	0.022		23.7	$7 \cdot 10^4$

la viscosité du fluide lourd. On choisit de prendre $\eta_2 = 0.1 \text{ Pa.s}$ afin que le régime de la bulle soit "Ellipsoïdal" dans chacune des phases. Le nombre de Morton vaut alors $\mathbf{M} = 5.7 \cdot 10^{-8}$ et celui de Laplace est compris entre $6.1 \cdot 10^4$ et $2.2 \cdot 10^5$ pour un diamètre de bulle entre 0.006 m et 0.022 m (tableau IV.12). Dans le tableau IV.12, nous donnons une valeur approchée pour le nombre de Reynolds puisque nous utilisons le diagramme IV.1 de Clift *et al.* pour le déterminer. Par conséquent la vitesse terminale de la bulle u_T est calculée approximativement ainsi que le nombre capillaire et celui de Weber définis respectivement par

$$\mathbf{Ca} = \frac{\eta_\ell u_T}{\sigma}, \quad \mathbf{We} = \frac{u_T^2 \rho_\ell d_b}{\sigma}.$$

Avec ces propriétés physiques, nous avons obtenu des premiers résultats mais beaucoup de difficultés que l’on détaillera dans la suite, sont encore observées. Ces résultats peuvent être intéressants pour l’étude de l’interaction corium/béton puisque si la température n’est pas trop élevée ($\approx 1800\text{K}$), le métal contient des éléments solides qui n’ont pas fondu et la viscosité est alors plus élevée ($\approx 0.05 \text{ Pa.s}$ [6]), on est alors dans un cadre proche de celui considéré ici.

TAB. IV.11 – Propriétés physiques du "corium visqueux" et de la vapeur d’eau

	ρ (kg.m ⁻³)	η (Pa.s)	λ (W.K ⁻¹ .m ⁻¹)	c_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
gaz (c_1)	0.1	$7.3 \cdot 10^{-5}$	0.29	2800
métal (c_2)	7800	0.1	30	600
oxyde (c_3)	4000	0.1	3	600

tensions de surface (N.m ⁻¹)	
gaz/métal σ_{12}	1.3
gaz/oxyde σ_{13}	0.8
oxyde/métal σ_{23}	1

Avec ces nouvelles propriétés (tableau IV.11), on s’est intéressé pour commencer au passage d’une bulle à travers une interface oxyde/métal. D’après les critères proposés par Greene *et al.* [50], la bulle traverse l’interface si son volume V est supérieur à

$$V_p = 9.9 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3 \quad (r_p = 6.2 \cdot 10^{-3} \text{ m})$$

TAB. IV.12 – Nombres adimensionnels dans le cas d’une bulle de vapeur d’eau dans du ”corium visqueux” pour les propriétés du tableau IV.11

	$d_b(\text{m})$	M	Eo	La	Re	$u_T \text{ (m.s}^{-1}\text{)}$	Ca	We
gaz/métal	0.006	$5.7 \cdot 10^{-8}$	2.1	$6.1 \cdot 10^4$	200	0.43	0.033	6.7
	0.008		3.8	$8.1 \cdot 10^4$	250	0.4	0.031	8.1
	0.012		8.5	$1.2 \cdot 10^5$	300	0.32	0.024	7.4
	0.022		28.5	$2.2 \cdot 10^5$	600	0.35	0.027	16.2
gaz/oxyde	0.006	$4.8 \cdot 10^{-7}$	1.8	$1.9 \cdot 10^4$	70	0.29	0.036	2.5
	0.008		3.1	$2.6 \cdot 10^4$	100	0.31	0.039	3.8
	0.012		7.1	$3.8 \cdot 10^4$	200	0.41	0.051	10.1
	0.022		23.7	$7 \cdot 10^4$	350	0.4	0.05	17.6

et il y a entraînement de la phase métallique dans la phase oxyde si

$$V > V_{e,1} = 2.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \quad (r_{e,1} = 8.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}).$$

Numériquement, on observe que la bulle traverse l’interface si son rayon r_b est supérieur à $r_p^{\text{num}} = 0.004 \text{ m}$ (figure IV.37). Comme dans l’étude du paragraphe IV.3, le rayon r_p^{num} est plus petit que celui donné par le critère. La différence entre r_p et r_p^{num} (différence plus grande que celle observée dans le paragraphe IV.3.1) est probablement due au fait que les forces d’inertie qui sont importantes ici, ne sont pas prises en compte par le critère. En effet, le nombre de Weber qui caractérise le rapport des forces d’inertie et de tension de surface est important (supérieur à 6.6, tableau IV.12) pour l’ascension d’une bulle dans le métal.

Sur la figure IV.38, on observe que pour $r_b = 0.011 \text{ m} > r_{e,1} = 0.0085 \text{ m}$, il n’y a pas de détachement de la phase lourde dans la phase légère par le passage de la bulle comme prédit par le critère. Ce comportement est cohérent puisque pour établir le critère on suppose que la bulle a une forme sphérique ce qui n’est pas le cas ici. Si la bulle n’est pas sphérique, le rayon critique est plus grand ([50], annexe E). De plus, la bulle se déforme beaucoup avant d’atteindre l’interface liquide/liquide. Les mouvements convectifs ont épaissi l’interface (comportements observés dans §III.1.5 et §IV.1.1). Ainsi la bulle a une taille plus petite lorsqu’elle atteint l’interface ce qui explique en partie qu’il n’y ait pas de détachement de la phase lourde.

Nous avons donc obtenu des premiers résultats satisfaisants dans le cadre de l’interaction corium/béton. Cependant, nous observons encore des difficultés numériques :

- instabilités de la vitesse dans la bulle (vitesses très importantes dans certaines parties de la bulle),
- utilisation d’un pas de temps très faible ($\Delta t = 5 \cdot 10^{-5}$),
- diminution de la taille de la bulle.

De plus, à terme il serait souhaitable d’obtenir des résultats lorsque la viscosité du métal est plus faible ($\eta_2 = 0.001 \text{ Pa.s}$).

Afin de poursuivre cette étude, il faudrait envisager d’utiliser un autre schéma en temps où dans un pas de temps on résoudrait alternativement le système de Cahn-Hilliard puis Navier-Stokes. Ainsi, les forces de tensions de surface, qui sont importantes ici, ne seraient pas explicitées dans les équations de Navier-Stokes ce qui permettrait probablement d’utiliser des pas de temps plus grands et réduirait peut-être l’apparition de vitesses importantes dans la bulle.

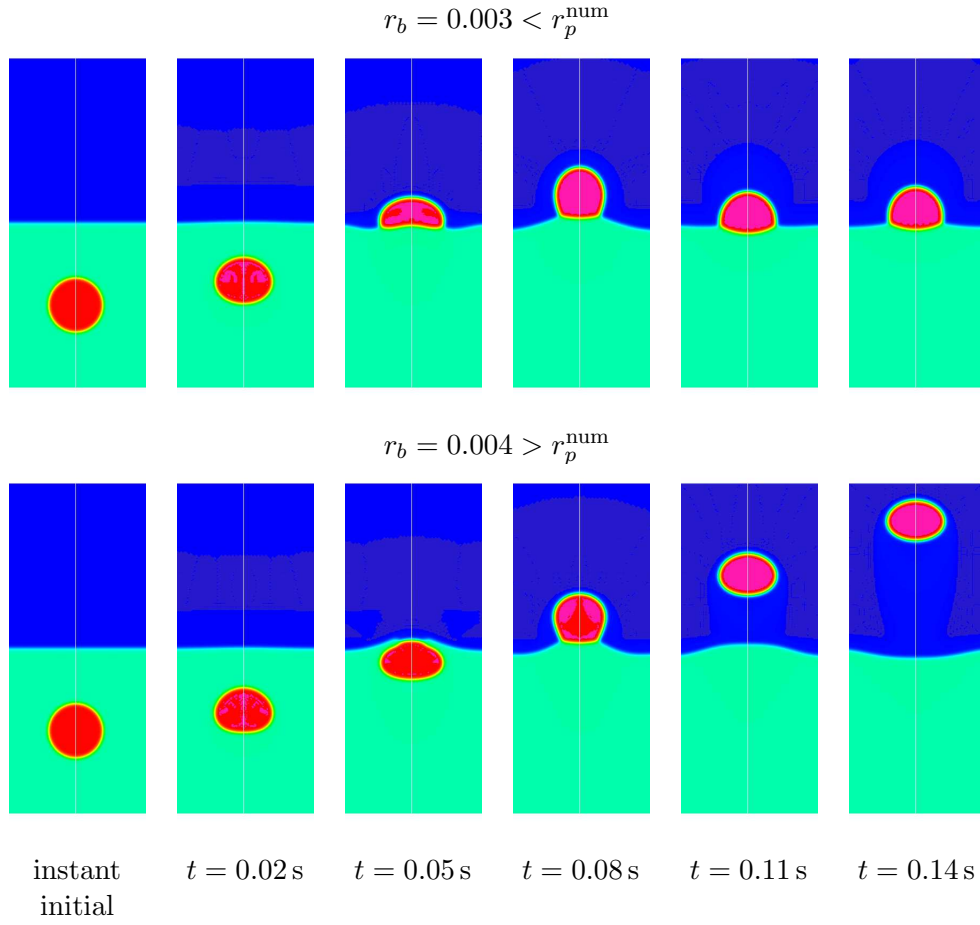


FIG. IV.37 – Ascension d’une bulle de vapeur d’eau dans un bain stratifié de ”corium visqueux” pour $r_b = 0.003$ m et $r_b = 0.004$ m

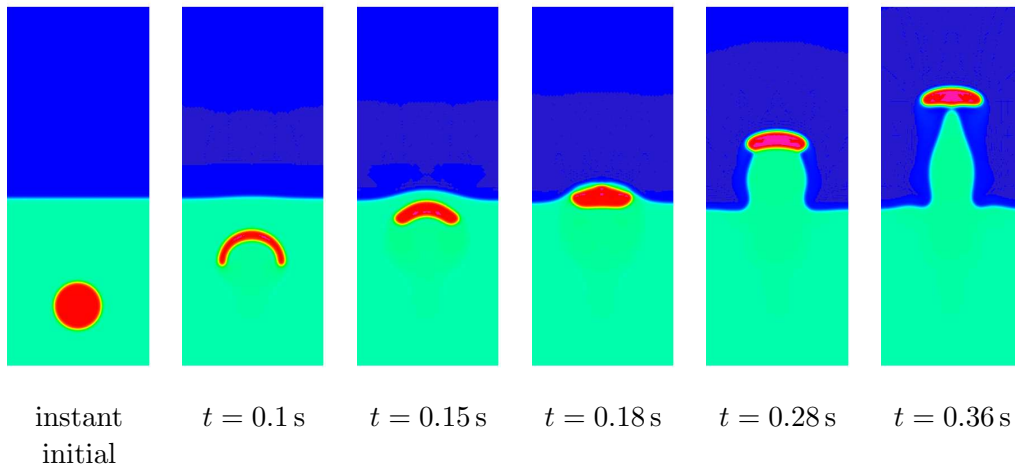


FIG. IV.38 – Ascension d’une bulle de vapeur d’eau dans un bain stratifié de ”corium visqueux” pour $r_b = 0.011$ m

Il serait intéressant d'étudier l'influence d'une stabilisation pour l'advection des paramètres d'ordre (type stabilisation SUPG) sur les distorsions des interfaces dues aux mouvements convectifs. Ces déformations des interfaces dépendent aussi du coefficient de mobilité. La dépendance de la mobilité avec la vitesse (e.g. [58]) permettrait de maintenir le rapport entre les termes convectifs et les termes de diffusion constant au cours du calcul ce qui réduirait probablement les déformations de l'épaisseur d'interface. Pour déterminer la dépendance de la mobilité avec la vitesse, on peut par exemple utiliser la définition du nombre de Peclet. De plus, on a noté que lorsqu'on prend des maillages plus fins, la diminution de la taille de la bulle était plus faible, il serait intéressant d'utiliser une méthode de raffinement local adaptatif afin d'avoir une meilleure précision dans les zones interfaciales.

Enfin, une stabilisation du terme d'advection dans les équations de Navier-Stokes pourrait peut être réduire les instabilités de la vitesse.

Conclusion

Dans ce travail, nous avons établi un modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes pour la simulation d'écoulements incompressibles, anisothermes, composés de trois phases non-miscibles, sans changement de phase. Le modèle permet de prendre en compte des propriétés physiques différentes pour chacune des phases ainsi que trois tensions de surface distinctes.

L'originalité de notre approche repose sur la forme particulière de l'énergie libre que l'on considère afin d'avoir un modèle algébriquement et dynamiquement consistant avec les systèmes diphasiques sous-jacents. Nous avons montré dans le chapitre I que ces propriétés sont fondamentales pour la description d'écoulements de trois phases non-miscibles puisqu'elles assurent qu'il n'y ait pas d'apparitions artificielles d'une des phases dans l'interface entre les deux autres.

L'étude menée pour avoir un problème bien posé et un modèle consistant a mis en évidence qu'il fallait considérer un potentiel de Cahn-Hilliard d'ordre 6 pour les situations d'étalement total, c'est-à-dire lorsqu'une des tensions de surface est inférieure à la somme des deux autres ($\Sigma_i < 0$).

Pour la description du système en écoulement, les équations de Cahn-Hilliard ont été couplées aux équations de Navier-Stokes en s'inspirant des travaux déjà réalisés pour les systèmes diphasiques.

Dans le chapitre II, l'analyse théorique du modèle de Cahn-Hilliard a permis de montrer l'existence et l'unicité globale de solutions faibles. En dimension 3, nous avons supposé la mobilité constante pour prouver l'unicité. Nous avons démontré aussi l'existence et l'unicité locale de solutions fortes qui sont continues en espace et en temps. La régularité de telles solutions a permis de montrer l'unicité en dimension 3 en considérant une mobilité variable et non dégénérée, ainsi que la stabilité asymptotique des états métastables.

Dans le chapitre III, nous avons proposé un schéma numérique pour la résolution du problème de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes. Le choix des espaces d'approximation a été fait afin de conserver le volume des phases : utilisation du même espace d'approximation pour la pression et les paramètres d'ordre. De plus, la conservation du volume est liée à la contrainte d'incompressibilité. Nous avons choisi d'utiliser la méthode de pénalité-projection qui nous a semblé être un bon compromis entre précision et coût de calcul.

L'étude sur l'estimation de l'énergie discrète a montré qu'il faut considérer une discrétisation semi-implicite en temps pour les termes non linéaires dans les équations de Cahn-Hilliard. En particulier ce choix a permis de simuler des écoulements triphasiques lorsqu'un des coefficients Σ_i est négatif comme par exemple le passage d'une bulle d'air à travers une interface eau/huile.

Les exemples numériques donnés dans le chapitre IV ont permis de valider le modèle.

L'étude sur les transferts thermiques dans un bain stratifié lors du passage d'une bulle a mis en évidence l'augmentation importante du flux thermique lorsqu'il y a entraînement (un facteur 10 dans l'exemple donné). Lorsqu'on considère le passage d'un train de bulles, les transferts de chaleur ont nettement augmenté dans la zone où l'interface liquide/liquide se situe.

Enfin, dans le cas du corium, les écoulements sont plus complexes que ceux considérés dans les études précédentes : écarts de masse volumique importants, grandes tensions de surface et faible viscosité dans la phase lourde ce qui entraîne de nombreuses difficultés, notamment des instabilités du champ de vitesse. Nous avons obtenu des résultats préliminaires sur le passage d'une bulle de vapeur d'eau à travers une interface oxyde/métal en augmentant artificiellement la viscosité de la phase métallique. Ces premiers résultats ont mis en avant les points numériques qu'il faudra travailler afin de pouvoir poursuivre cette étude.

Dans la suite, plusieurs développements sont envisageables afin d'améliorer le schéma numérique :

- utiliser un couplage en temps entre les équations de Cahn-Hilliard et Navier-Stokes où la force capillaire ne serait pas explicite ce qui permettrait de prendre des pas de temps plus grands en particulier lorsque les tensions de surface sont grandes ;
- s'affranchir de la condition sur les espaces d'approximation de la pression et des paramètres d'ordre. Ceci permettrait d'augmenter en ordre l'approximation des paramètres d'ordre et des potentiels chimiques ainsi que celle de la vitesse ;
- utiliser une méthode de raffinement local adaptatif. Pour cela, il faut envisager d'autres espaces d'approximation pour la vitesse car l'élément \mathbb{P}_1 -bulle est peu approprié à cause du degré de liberté qui se trouve dans la maille ;
- étudier l'influence d'une stabilisation (type SUPG) pour les termes d'advection des équations de Cahn-Hilliard et Navier-Stokes sur les distorsions de l'interface et sur les instabilités du champ de vitesse
- étendre l'étude au cas d'une géométrie tridimensionnelle sans symétrie en utilisant du calcul parallèle par exemple.

Ces améliorations sont nécessaires afin de poursuivre l'étude sur les transferts entre la phase oxyde et métallique du corium. Dans la suite, il faudra étudier l'influence des paramètres tels que la taille des bulles, le flux gazeux ou les propriétés physiques des phases. Il reste à déterminer comment introduire ces résultats dans une description à l'échelle macroscopique (i.e. une échelle intermédiaire entre celle traitée ici par simulation numérique directe et celle utilisée par le code MEDICIS). Pour cela, on pourrait s'inspirer des travaux menés par Achdou *et al.* [1] ou Wood *et al.* [106] sur la description de surfaces hétérogènes effectives. Ces études permettraient à terme d'appuyer un choix de corrélations dans le code à zones MEDICIS.

Enfin, des questions restent ouvertes pour étendre le modèle à des situations plus complexes. Par exemple, comment s'affranchir de la condition $\Sigma_1\Sigma_2 + \Sigma_1\Sigma_3 + \Sigma_2\Sigma_3 > 0$ sur les coefficients capillaires dont l'interprétation physique n'est pas claire ou généraliser le modèle pour des tensions de surface variables. D'autre part, la généralisation du modèle à n phases non-miscibles avec $n > 3$ tout en conservant les propriétés de consistance ne semble pas direct : par exemple pour 4 phases, il y a 6 tensions de surface différentes et seulement 4 coefficients Σ_i .

Annexes

Annexe A

Modèle de Cahn-Hilliard diphasique

Le modèle de Cahn-Hilliard, dans la classe des interfaces diffuses, repose sur une représentation des interfaces par des zones d'épaisseur finie. La composition du mélange est décrite par une fonction régulière c , appelée *paramètre d'ordre* valant 1 dans une des phases et 0 dans l'autre, et variant continûment entre 0 et 1 dans l'interface [15, 59, 107]. L'évolution du système est décrit à travers la minimisation d'une énergie libre notée \mathcal{F} , définie par

$$\mathcal{F} = \int_{\Omega} \left[AF(c) + \frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2 \right] dx \quad \text{avec } F(c) = c^2(1-c)^2.$$

L'équation de Cahn-Hilliard, vérifiée par c sur le domaine Ω , s'écrit

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (M_0 \nabla (AF'(c) - \lambda \Delta c)), \quad (\text{A.1})$$

où M_0 est un paramètre du modèle, appelé *mobilité*. De plus, les conditions au bord de Ω , noté Γ , sont

$$\nabla (AF'(c) - \lambda \Delta c) \cdot n = \nabla c \cdot n = 0. \quad (\text{A.2})$$

Les coefficients A et λ dépendent de la tension de surface σ et de l'épaisseur d'interface ε , qui sont deux grandeurs intrinsèques du modèle.

Le premier paragraphe porte sur l'établissement des équations de Cahn-Hilliard de manière formelle. Dans le second paragraphe, on détermine le profil à l'équilibre du paramètre d'ordre pour une interface plane en 1D ainsi que les relations entre les coefficients A et λ et les grandeurs intrinsèques du modèle.

A.1 Equation d'évolution du paramètre d'ordre

On propose de retrouver formellement les équations de Cahn-Hilliard à partir de la définition de l'énergie libre.

Soit $L_m^2(\Omega)$ sous espace de $L^2(\Omega)$ défini par $L_m^2(\Omega) = \{\varphi \in L_m^2(\Omega) \mid \int_{\Omega} \varphi dx = 0\}$. On note $(\cdot, \cdot)_{-1}$ le produit scalaire défini sur $L_m^2(\Omega)$ par

$$(f, v)_{-1} = \int_{\Omega} \nabla \varphi_f \cdot \nabla \varphi_v dx, \quad \forall f, v \in L_m^2(\Omega)$$

où φ_g est la solution dans $L_m^2(\Omega) \cap H^2(\Omega)$ de

$$\begin{cases} -\Delta \varphi_g = g \text{ sur } \Omega, & \text{avec } g \in L_m^2(\Omega), \\ \frac{\partial \varphi_g}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma. \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Afin de minimiser l'énergie, l'équation de Cahn-Hilliard est une équation de flot de gradient de \mathcal{F} pour le produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{-1}$ [75]

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \mathcal{F}(c). \quad (\text{A.4})$$

Calculons tout d'abord $\frac{d}{dh} \mathcal{F}(c + hv)|_{h=0}$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dh} \mathcal{F}(c + hv)|_{h=0} &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathcal{F}(c + hv) - \mathcal{F}(c)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Omega} \left[A \frac{F(c + hv) - F(c)}{h} + \frac{\lambda}{2h} (|\nabla(c + hv)|^2 - |\nabla(c)|^2) \right] dx \\ &= \int_{\Omega} \left[AF'(c) \cdot v + \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\lambda}{2h} (|\nabla(c)|^2 + 2h \nabla c \cdot \nabla v + h^2 |\nabla(v)|^2 - |\nabla(c)|^2) \right] dx \\ &= \int_{\Omega} [AF'(c) \cdot v - \lambda \Delta c \cdot v] dx + \int_{\Gamma} v \nabla c \cdot n ds. \end{aligned}$$

Or, d'après (A.2), $\nabla c \cdot n = 0$ sur Γ et donc on a

$$\frac{d}{dh} \mathcal{F}(c + hv)|_{h=0} = \int_{\Omega} (AF'(c) - \lambda \Delta c) \cdot v dx. \quad (\text{A.5})$$

Calculons maintenant le terme $(\nabla \mathcal{F}, v)_{-1}$

$$\begin{aligned} (\nabla \mathcal{F}, v)_{-1} &= \int_{\Omega} \nabla \varphi_{\nabla \mathcal{F}} \nabla \varphi_v dx \\ &= - \int_{\Omega} \varphi_{\nabla \mathcal{F}} \Delta \varphi_v dx + \int_{\Gamma} \varphi_{\nabla \mathcal{F}} \nabla \varphi_v \cdot n. \end{aligned}$$

D'après les définitions (A.3) de φ_v et $\varphi_{\nabla \mathcal{F}}$, il vient

$$(\nabla \mathcal{F}, v)_{-1} = - \int_{\Omega} \varphi_{\nabla \mathcal{F}} \cdot v dx. \quad (\text{A.6})$$

Les équations (A.5) et (A.6) entraînent

$$\varphi_{\nabla \mathcal{F}} = -(F'(c) - \lambda \Delta c).$$

Ainsi, la définition de $\varphi_{\nabla \mathcal{F}}$ implique

$$\nabla \mathcal{F} = -\Delta(F'(c) - \lambda \Delta c).$$

Il reste à introduire le paramètre M_0 en modifiant la définition du produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{-1}$. Le produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{-1, M_0}$ est défini sur $L_m^2(\Omega)$ par

$$(f, v)_{-1, M_0} = \int_{\Omega} M_0 \nabla \varphi_f \cdot \nabla \varphi_v dx \quad \forall f, v \in L_m^2(\Omega),$$

où on note φ_g la solution de

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (M_0 \nabla \varphi_g) = g \text{ sur } \Omega, & \text{avec } g \in L_m^2(\Omega), \\ \frac{\partial \varphi_g}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma. \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

En conclusion, l'équation (A.4) s'écrit :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \mathcal{F}(c) = \nabla \cdot (M_0 \nabla (AF'(c) - \lambda \Delta c)).$$

De plus, on note $\mu = \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} = AF'(c) - \lambda \Delta c$, la dérivée fonctionnelle de \mathcal{F} par rapport à c , appelée *potentiel chimique généralisé*.

Le modèle de Cahn-Hilliard vérifie deux propriétés importantes. Tout d'abord, grâce aux conditions au bord vérifiées par μ , le modèle conserve le volume de chaque phase au cours du temps

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} c \, dx = \int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial t} \, dx = \int_{\Omega} \nabla \cdot (M_0 \nabla \mu) \, dx = \int_{\Gamma} M_0 \nabla \mu \cdot n \, ds = 0.$$

Ensuite, l'estimation d'énergie pour le modèle de Cahn-Hilliard s'écrit

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F}(c) = - \int_{\Omega} M_0 |\nabla \mu|^2 \, dx.$$

En effet, le calcul formel de $\frac{d}{dt} \mathcal{F}(c)$ donne, en utilisant les conditions au bord sur μ ,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{F}(c) &= \int_{\Omega} \left[\frac{d}{dt} (AF(c)) + \frac{d}{dt} \left(\frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2 \right) \right] dx \\ &= \int_{\Omega} \left[AF'(c) \frac{\partial c}{\partial t} + \lambda \nabla c \cdot \frac{\partial \nabla c}{\partial t} \right] dx \\ &= \int_{\Omega} \left[\frac{\partial c}{\partial t} (AF'(c) - \lambda \Delta c) \right] dx \\ &= \int_{\Omega} \mu \frac{\partial c}{\partial t} \, dx = \int_{\Omega} \mu \nabla \cdot (M_0 \nabla \mu) \, dx = - \int_{\Omega} M_0 |\nabla \mu|^2 \, dx. \end{aligned}$$

A.2 Solution à l'équilibre d'une interface plane en dimension 1

On s'intéresse maintenant, à l'équilibre d'une interface plane en dimension 1. Cette étude permet de déterminer le profil du paramètre d'ordre ainsi que les propriétés intrinsèques du modèle qui sont l'épaisseur d'interface et la tension de surface.

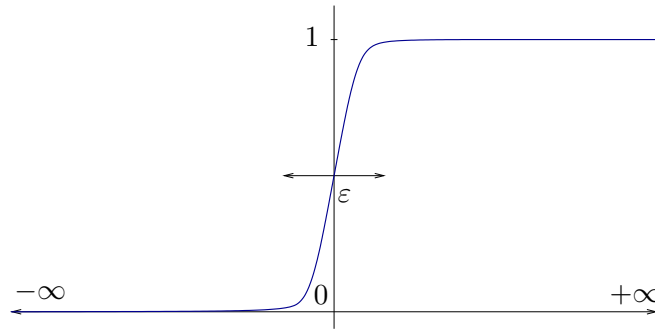


FIG. A.1 – Profil du paramètre d'ordre pour une interface plane en 1D

On va chercher la solution d'équilibre de ce problème 1D, c'est-à-dire un minimum de l'énergie libre \mathcal{F} . Pour cela, on utilise l'équation (A.5) et on cherche c vérifiant

$$A \frac{d}{dc} F(c) - \lambda \frac{d^2 c}{dx^2} = 0.$$

Cette équation peut s'écrire aussi sous la forme

$$\lambda \frac{d^2 c}{dx^2} \frac{dc}{dx} = A \frac{d}{dc} F(c) \frac{dc}{dx}.$$

En intégrant l'équation entre $-\infty$ et x , on obtient

$$\int_{-\infty}^x \lambda \frac{d^2 c}{ds^2} \frac{dc}{ds} ds = \int_{-\infty}^x A \frac{dF(c)}{ds} ds.$$

Le calcul de l'intégrale du membre de gauche est

$$\int_{-\infty}^x \lambda \frac{d^2 c}{ds^2} \frac{dc}{ds} ds = \frac{\lambda}{2} \left(\frac{dc}{dx} \right)^2$$

car $\frac{dc}{dx} = 0$ en $x = -\infty$ puisqu'on suppose que c ne subit pas de variation dans les phases. Comme $F(0) = 0$, on a alors

$$\frac{\lambda}{2} \left(\frac{dc}{dx} \right)^2 = AF(c). \quad (\text{A.8})$$

Grâce à (A.8), le paramètre d'ordre c vérifie

$$\frac{dc}{dx} = \sqrt{\frac{2A}{\lambda}} \sqrt{F(c)},$$

ce qui entraîne

$$\frac{dc}{c(1-c)} = \sqrt{\frac{2A}{\lambda}} dx,$$

avec $c(x = -\infty) = 0$ et $c(x = +\infty) = 1$. Le changement de variable $v = 2c - 1$ implique

$$\frac{dv}{1-v^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2A}{\lambda}} dx,$$

et donc v vérifie

$$\operatorname{arctanh}(v) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2A}{\lambda}} x + K.$$

On impose $c(0) = \frac{1}{2}$ (position de l'interface) i.e. $v(0) = 0$ ce qui implique $K = 0$. Finalement, il vient

$$v(x) = \tanh \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{2A}{\lambda}} x \right)$$

c'est-à-dire

$$c(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{2A}{\lambda}} x \right).$$

On peut aussi déterminer les relations entre A et λ et les grandeurs intrinsèques : σ la tension de surface et ε l'épaisseur d'interface. Commençons par la tension de surface qui est définie en 1D par

$$\sigma = \mathcal{F}(c) = \int_{\mathbb{R}} \left[AF(c) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{dc}{dx} \right)^2 \right] dx.$$

En utilisant (A.8), l'équation précédente s'écrit

$$\sigma = \int_{\mathbb{R}} \lambda \left(\frac{dc}{dx} \right)^2 dx = \int_0^1 \lambda \frac{dc}{dx} dc = \int_0^1 \lambda \sqrt{\frac{2A}{\lambda}} \sqrt{F(c)} dc = \frac{1}{6} \sqrt{2\lambda A}. \quad (\text{A.9})$$

D'autre part, l'épaisseur d'interface est définie par

$$\varepsilon = \frac{1}{\max \left(\frac{dc}{dx} \right)}$$

où

$$\max \left(\frac{dc}{dx} \right) = \sqrt{\frac{2A}{\lambda}} \max_{0 \leq c \leq 1} \sqrt{F(c)} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{2A}{\lambda}}.$$

Finalement, l'expression de ε en fonction de A et λ est

$$\varepsilon = 4 \sqrt{\frac{\lambda}{2A}}. \quad (\text{A.10})$$

Des relations (A.9) et (A.10), il vient

$$\lambda = \frac{3}{2} \sigma \varepsilon \quad \text{et} \quad A = 12 \frac{\sigma}{\varepsilon}.$$

Ainsi, l'énergie libre s'écrit

$$\mathcal{F} = \int_{\Omega} \left[12 \frac{\sigma}{\varepsilon} c^2 (1-c)^2 + \frac{3}{4} \sigma \varepsilon |\nabla c|^2 \right] dx,$$

et l'expression de c à l'équilibre est donnée par

$$c(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} x \right),$$

solution de

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{3}{2} \sigma \varepsilon c'' + 24 \frac{\sigma}{\varepsilon} c(1-c)(1-2c) = 0, \\ \lim_{+\infty} c = 1, \\ \lim_{-\infty} c = 0, \\ c(0) = \frac{1}{2}. \end{array} \right.$$

Annexe B

Quelques résultats mathématiques

Cette annexe présente des résultats mathématiques techniques, utilisés dans les chapitres I et II. Les preuves des lemmes I.3.11, I.3.13 et I.3.16 sont, tout d'abord, détaillées. Puis nous rappelons des résultats d'analyse fonctionnelle, utilisés classiquement pour l'étude d'existence et d'unicité de solutions pour des équations aux dérivées partielles (pour plus de détails voir le chapitre 2 de [16], [19], [72]) .

B.1 Preuves des lemmes I.3.11, I.3.13 et I.3.16

Nous donnons tout d'abord la preuve du lemme I.3.11.

Lemme

Soit $f : \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$ une fonction régulière. Les deux propriétés suivantes sont équivalentes :

- 1. $f(c, 1 - c, 0) = f(c, 0, 1 - c) = f(0, c, 1 - c) = 0$, pour tout $c \in \mathbb{R}$.*
- 2. Il existe deux fonctions régulières g et h telles que*

$$f(c_1, c_2, c_3) = c_1 c_2 c_3 g(c_1, c_2, c_3) + (c_1 + c_2 + c_3 - 1) h(c_1, c_2, c_3).$$

Preuve.

On pose le changement de variable suivant $(X, Y, Z) = (x + y + z - 1, y, z)$ et on définit \tilde{f} par

$$f(x, y, z) = \tilde{f}(X, Y, Z).$$

Comme $f(x, 1 - x, 0) = 0$ pour tout $x \in \mathbb{R}$, on a

$$\tilde{f}(0, Y, 0) = 0 \text{ pour tout } Y \in \mathbb{R}. \tag{B.1}$$

Grâce à (B.1), en utilisant un développement de Taylor avec reste intégral, il vient

$$\tilde{f}(X, Y, Z) = X \widetilde{h}_1(X, Y, Z) + Z \widetilde{g}_1(X, Y, Z),$$

ce qui entraîne

$$f(x, y, z) = (x + y + z - 1)h_1(x, y, z) + z g_1(x, y, z).$$

En utilisant $f(x, 0, 1 - x) = 0$, on obtient $g_1(x, 0, 1 - x) = 0$ pour tout $x \in \mathbb{R}$. Il suffit alors d'appliquer la démarche précédente pour g_1 . Finalement, en utilisant de la même manière $f(0, x, 1 - x) = 0$, il vient

$$f(x, y, z) = (x + y + z - 1)h(x, y, z) + xyzg(x, y, z).$$

■

Le lemme I.3.13 porte sur des propriétés vérifiées par les fonctions

$$\varphi_\alpha : x \mapsto \frac{1}{(1+x^2)^\alpha} \quad \text{et} \quad \Phi_\alpha : x \mapsto x^2 \varphi_\alpha.$$

Rappelons-en l'énoncé.

Lemme

1. Pour tout $\alpha \geq 0$, il existe $K_\alpha > 0$ tel que

$$\varphi_\alpha(x) \leq \frac{K_\alpha}{|x|^{2\alpha}}, \quad |\varphi'_\alpha(x)| \leq \frac{K_\alpha}{|x|^{2\alpha+1}}, \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

$$\left| x - \frac{1}{2} \Phi'_\alpha(x) \right| \leq K_\alpha \frac{|x|^3}{1+x^2} \leq \frac{K_\alpha}{2} |x|^2, \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

2. On a

$$\Phi_\alpha \text{ est convexe, pour tout } \alpha \in \left[0, \frac{8}{17}\right],$$

$$x \Phi'_\alpha(x) \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \text{ pour tout } \alpha \in [0, 1].$$

Preuve.

1. Les deux premières inégalités se déduisent directement de la forme de φ_α . Pour la troisième propriété, calculons $\left| x - \frac{1}{2} \Phi'_\alpha(x) \right|$

$$\begin{aligned} \left| x - \frac{1}{2} \Phi'_\alpha(x) \right| &= \left| x - \frac{x(1+(1-\alpha)x^2)}{(1+x^2)^{\alpha+1}} \right| \leq \frac{|x| (1+x^2)^{\alpha+1} + |x| + |1-\alpha||x|^3}{(1+x^2)^{\alpha+1}} \\ &\leq K_\alpha \frac{|x| (1+x^2)((1+x^2)^\alpha + 1)}{(1+x^2)^{\alpha+1}} \leq K'_\alpha \frac{|x|^3}{1+x^2} \end{aligned}$$

Enfin, on utilise l'inégalité de Young

$$\frac{|x|^3}{1+x^2} \leq \frac{|x|^2}{2}.$$

2. Pour montrer que Φ_α est convexe pour $\alpha \in [0, \frac{8}{17}]$, il faut que

$$\Phi''_\alpha(x) = \frac{2(1+(2-5\alpha)x^2+(1-3\alpha+2\alpha^2)x^4)}{(1+x^2)^{\alpha+2}}$$

soit positive ou nulle pour tout $x \in \mathbb{R}$. On étudie alors le polynôme

$$P(X) = 1 + (2-5\alpha)X + (1-3\alpha+2\alpha^2)X^2,$$

qui a comme discriminant

$$\Delta = \alpha(17\alpha - 8).$$

Comme $\alpha \in [0, \frac{8}{17}]$, alors $1-3\alpha+2\alpha^2 > 0$ et $\Delta \leq 0$. Donc $P(X) \geq 0$ pour tout $X \in \mathbb{R}$ ce qui entraîne que Φ''_α est une fonction positive.

Enfin, le calcul de $x \Phi'_\alpha(x)$ donne

$$x \Phi'_\alpha(x) = \frac{2x^2(1+(1-\alpha)x^2)}{(1+x^2)^{\alpha+1}}$$

qui est bien positif pour tout $\alpha \in [0, 1]$. ■

On rappelle maintenant le lemme I.3.16

Lemme

Pour tout $0 < \delta < 1$, on a

$$x^2(1-x)^2 \geq \frac{\delta}{2}x^4 - \frac{1}{2}\frac{\delta}{(1-\delta)^2}, \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

Preuve.

Soit $0 < \delta < 1$. Posons $f_\delta = (1-x)^2 - \delta x^2$ qui admet un minimum en $x_\delta = \frac{1}{1-\delta}$ valant $-\frac{\delta}{1-\delta}$. Ainsi on a

$$(1-x)^2 \geq \delta x^2 - \frac{\delta}{1-\delta}, \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

En multipliant par x^2 l'inégalité, il vient

$$x^2(1-x)^2 \geq \delta x^4 - \frac{\delta}{1-\delta}x^2, \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

Enfin l'inégalité de Young appliquée sur le dernier terme entraîne

$$\frac{\delta}{1-\delta}x^2 \leq \frac{\delta}{2}x^4 + \frac{\delta}{2(1-\delta)^2},$$

ce qui permet de conclure. ■

B.2 Rappels d'analyse fonctionnelle

Dans ce paragraphe, nous rappelons les énoncés de théorèmes d'analyse fonctionnelle qui sont utilisés dans les chapitres I et II, notamment pour démontrer l'existence et l'unicité des solutions du problème (I.10).

Nous rappelons, tout d'abord, le lemme de Gronwall uniforme B.2.2 [16, 99]. Ensuite, quelques inégalités sont données, en particulier les inégalités de Poincaré B.2.3 [16, 19], d'Agmon B.2.4 [2], et celles issues des propriétés de régularité de l'opérateur Laplacien B.2.4 [99]. Enfin, nous rappelons la notion d'espaces interpolés B.2.5 [72] avant de présenter un théorème de compacité B.2.6 dont la preuve est donnée dans [16].

Inégalité différentielle et lemmes de Gronwall

Théorème B.2.1

Soient α et β deux constantes positives. Soit y une fonction de $C^1(\mathbb{R}^+, \mathbb{R}^+)$ vérifiant l'inégalité différentielle

$$y'(t) + \alpha y(t) \leq \beta$$

alors on a

$$\forall t \geq 0, \quad y(t) \leq e^{-\alpha t} y(0) + \frac{\beta}{\alpha}.$$

Théorème B.2.2 (Lemme de Gronwall uniforme)

Soient a, b, y trois fonctions continues, positives définies sur $[0, +\infty[$. On suppose que y est dérivable et vérifie pour tout $t \geq 0$

$$y'(t) \leq a(t) + b(t)y(t).$$

On suppose de plus qu'il existe trois constantes C_1, C_2, C_3 telles que pour tout $t \geq 0$ on ait

$$\int_t^{t+1} a(s)ds \leq C_1, \quad \int_t^{t+1} b(s)ds \leq C_2, \quad \int_t^{t+1} y(s)ds \leq C_3,$$

alors pour tout $t \geq 0$, on a l'estimation

$$y(t) \leq (\max(y(0), C_3) + C_1)e^{C_2}.$$

Inégalités fondamentales

Proposition B.2.3 (Inégalité de Poincaré-Wirtinger)

Soit Ω un ouvert connexe borné lipschitzien de \mathbb{R}^d , alors il existe une constante C telle que pour toute fonction f de $H^1(\Omega)$, on a

$$\left| f - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} f \, dx \right|_{H^1} \leq C |\nabla f|_{L^2}.$$

Proposition B.2.4

Soit Ω un ouvert de \mathbb{R}^d , borné, connexe, de classe $C^{1,1}$.

- Il existe une constante C telle que pour toute fonction $f \in H^2(\Omega)$ vérifiant $\frac{\partial f}{\partial n} = 0$ sur Γ , on a

$$\left| f - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} f \, dx \right|_{H^2} \leq C |\Delta f|_{L^2} \quad (\text{régularité du laplacien}).$$

- Il existe une constante C telle que pour toute fonction $f \in H^2$, on a les inégalités d'Agmon

$$\begin{cases} \text{en dimension 2,} & |f|_{L^\infty} \leq C |f|_{L^2}^{\frac{1}{2}} |f|_{H^2}^{\frac{1}{2}}, \\ \text{en dimension 3,} & |f|_{L^\infty} \leq C |f|_{L^2}^{\frac{1}{4}} |f|_{H^2}^{\frac{3}{4}}. \end{cases}$$

Interpolations et compacité**Théorème B.2.5**

Soient X et Y deux espaces de Hilbert séparables. On suppose que X s'injecte de façon continue et dense dans Y .

1. Pour tout $X, Y, \theta \in [0, 1]$, on a

$$|u|_{[X,Y]_\theta} \leq |u|_X^{1-\theta} |u|_Y^\theta$$

où $[X, Y]_\theta$ est l'espace interpolé d'ordre θ de X et Y .

2. Soit Ω un ouvert régulier de \mathbb{R}^d , $s_1 \leq s_2$ deux réels positifs et $\theta \in [0, 1]$, on a

$$[H^{s_2}(\Omega), H^{s_1}(\Omega)]_\theta = H^{(1-\theta)s_2 + \theta s_1}(\Omega).$$

Théorème B.2.6 (Théorème d'Aubin-Lions-Simon)

Soient $B_0 \subset B_1 \subset B_2$ trois espaces de Banach. On suppose que l'injection de B_1 dans B_2 est continue et que l'injection de B_0 dans B_1 est compacte. Soient p, r tels que $1 \leq p, r \leq +\infty$. Pour $T > 0$, on note

$$E_{p,r} = \left\{ v \in L^p(0, T, B_0), \frac{dv}{dt} \in L^r(0, T, B_2) \right\}.$$

- Si $p < +\infty$, l'injection de $E_{p,r}$ dans $L^p(0, T, B_1)$ est compacte.
- Si $p = +\infty$ et si $r > 1$, l'injection de $E_{p,r}$ dans $\mathcal{C}^0([0, T], B_1)$ est compacte.

Annexe C

Relations de sauts aux interfaces

On considère un système diphasique en écoulement incompressible, isotherme, sans changement de phase au sein d'un domaine régulier Ω , de frontière Γ . Si les zones de transitions entre les phases sont considérées infiniment fines (représentation de Gibbs), l'évolution de ce système est gouvernée par les équations de bilan de masse et de quantité de mouvement à l'intérieur de chaque phase et par leur relation de saut aux interfaces. Nous allons dans cette annexe déterminer ces relations de sauts.

Tout d'abord, écrivons les équations de Navier-Stokes pour un écoulement incompressible composé d'une seule phase, vérifiées par la vitesse u , la pression p et la masse volumique ϱ , sur le domaine Ω

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla(\varrho u) = 0, \quad (\text{C.1})$$

$$\frac{\partial \varrho u}{\partial t} + \nabla(\varrho u u) = \nabla \cdot (\tau) + \varrho g \quad (\text{C.2})$$

où $\tau = -p\text{Id} + \eta(\nabla u + \nabla u^t)$ est le tenseur de contrainte, η la viscosité dynamique, g l'accélération de la pesanteur. On associe au système d'équations (C.1)-(C.2) des conditions initiales et des conditions aux limites sur Γ satisfaites par la vitesse et la pression.

Considérons maintenant un système composé de deux phases i et j et notons I_{ij} l'interface entre les deux phases (figure C.1). On introduit une paramétrisation de l'interface I_{ij}

$$X = G_1(v, w, t), \quad Y = G_2(v, w, t), \quad Z = G_3(v, w, t)$$

ainsi que la vitesse de l'interface ω

$$\omega = \left(\frac{\partial G_1(v, w, t)}{\partial t}, \frac{\partial G_2(v, w, t)}{\partial t}, \frac{\partial G_3(v, w, t)}{\partial t} \right)^t.$$

Pour décrire le système diphasique, écrivons les équations (C.1) et (C.2) au sens des distributions.

Nous rappelons les formules de dérivation au sens des distributions pour une fonction infiniment dérivable sauf en I_{ij} . On note $\{ \}$ la distribution de la fonction dérivée usuelle et $[[^j_i]$ le saut de la fonction à l'interface I_{ij} .

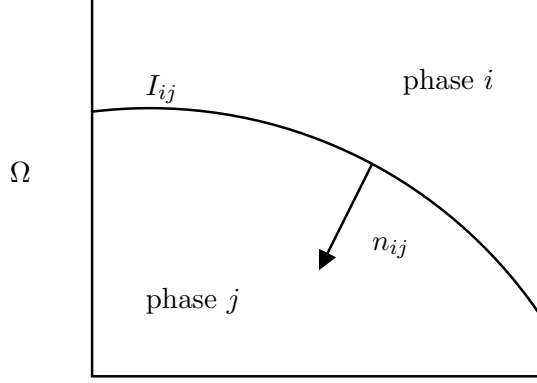


FIG. C.1 – Système diphasique

Proposition C.0.1

Soient f une fonction scalaire et A une fonction vectorielle, qui sont indéfiniment dérivables dans $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ sauf sur une hypersurface I_t de vitesse ω . Les formules de dérivation au sens des distributions sont :

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x_k} &= \left\{ \frac{\partial f}{\partial x_k} \right\} + [fn_k]_i^j \delta(I_t), \\ \frac{\partial f}{\partial t} &= \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} \right\} - [f\omega \cdot n]_i^j \delta(I_t), \\ \nabla f &= \{\nabla f\} + [fn]_i^j \delta(I_t), \\ \nabla \cdot A &= \{\nabla \cdot A\} + [A \cdot n]_i^j \delta(I_t).\end{aligned}$$

En prenant l'équation (C.1) au sens des distributions, il vient

$$\left\{ \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla(\varrho u) \right\} - [\varrho]_i^j \omega \cdot n_{ij} \delta(I_{ij}) + [\varrho u \cdot n_{ij}]_i^j \delta(I_{ij}) = 0. \quad (\text{C.3})$$

De même, on obtient pour l'équation (C.2)

$$\left\{ \frac{\partial \varrho u}{\partial t} + \nabla(\varrho u u) - \nabla \cdot (\tau) + \varrho g \right\} + [\varrho u(u - \omega) \cdot n_{ij}]_i^j \delta(I_{ij}) = [\tau n_{ij}]_i^j \delta(I_{ij}) + F_{\text{surfacique}}^\sigma \quad (\text{C.4})$$

où $F_{\text{surfacique}}^\sigma$ est la force de tension de surface modélisée par

$$F_{\text{surfacique}}^\sigma = \sigma \kappa n_{ij} + \nabla_s \cdot \sigma,$$

avec σ la tension de surface et κ la courbure de l'interface [31, 105].

Ainsi on obtient des équations vérifiées dans chacune des phases

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varrho_k}{\partial t} + \nabla(\varrho_k u_k) &= 0, \\ \frac{\partial \varrho_k u_k}{\partial t} + \nabla(\varrho_k u_k u_k) - \nabla \cdot (\tau_k) + \varrho_k g &= 0,\end{aligned}$$

où $k = i$ ou j . De plus, comme on suppose que l'écoulement est incompressible, il vient finalement pour $k = i$ ou j

$$\nabla \cdot u_k = 0,$$

$$\varrho_k \left(\frac{\partial u_k}{\partial t} + u_k \cdot \nabla u_k \right) - \nabla \cdot (\tau_k) + \varrho_k g = 0.$$

Des équations (C.3) et (C.4), on obtient les relations de sauts suivantes à l'interface I_{ij}

$$\begin{aligned} [\varrho(u - \omega) \cdot n_{ij}] &= 0, \\ [\varrho u(u - \omega) \cdot n_{ij}] &= [\tau n_{ij}] + F_{surfacique}^\sigma. \end{aligned} \quad (C.5)$$

Si on suppose qu'il n'y a pas de transfert de masse à l'interface, la première relation de saut entraîne

$$\varrho_i(u_i - \omega) \cdot n_{ij} = \varrho_j(u_j - \omega) \cdot n_{ij} = 0. \quad (C.6)$$

Comme les masses volumiques sont non nulles, il vient

$$u_j \cdot n_{ij} = \omega \cdot n_{ij} = u_i \cdot n_{ij}.$$

De plus, si on suppose que la tension de surface est constante alors la divergence surfacique de σ est nulle. En utilisant les équations (C.5) et (C.6), on a

$$(\tau_j - \tau_i)n_{ij} + \sigma \kappa n_{ij} = 0.$$

Finalement, les vitesses normales sont continues à l'interface I_{ij} et le saut du tenseur de contrainte normal dépend de la force de tension de surface.

Annexe D

Angles de contact et triangle de Neumann

On considère une bulle piégée entre deux phases liquides stratifiées (figure D.1). On note θ_1 , θ_2 , θ_3 les angles de contact entre les trois phases qui sont liés par la relation

$$\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 = 2\pi. \quad (\text{D.1})$$

On propose ici d'établir les relations entre les tensions de surface et les angles de contact ainsi que les positions des interfaces, considérées infiniment fines, à l'équilibre lorsqu'il y a existence des points triples [87, 89].

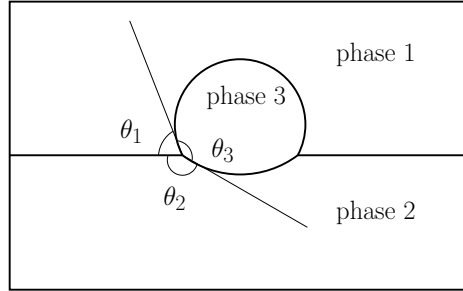


FIG. D.1 – Lentille piégée entre deux phases liquides stratifiées

A l'équilibre, la résultante des forces appliquées au point triple est nulle. Par conséquent, la somme des composantes des forces suivant la direction de chaque interface est nulle. En considérant que les interfaces sont rectilignes au voisinage du point triple, on obtient

$$\sigma_{12} + \sigma_{13} \cos \theta_1 + \sigma_{23} \cos \theta_2 = 0, \quad (\text{D.2})$$

$$\sigma_{12} \cos \theta_1 + \sigma_{13} + \sigma_{23} \cos \theta_3 = 0, \quad (\text{D.3})$$

$$\sigma_{12} \cos \theta_2 + \sigma_{13} \cos \theta_3 + \sigma_{23} = 0. \quad (\text{D.4})$$

Comme les angles sont liés par la relation (D.1), le déterminant des coefficients s'annule

$$\begin{vmatrix} 1 & \cos \theta_1 & \cos \theta_2 \\ \cos \theta_1 & 1 & \cos \theta_3 \\ \cos \theta_2 & \cos \theta_3 & 1 \end{vmatrix} = 0.$$

Ainsi une équation du système (D.2)-(D.4) se déduit des deux autres.

En multipliant (D.2) par $\cos \theta_3$ et (D.3) par $\cos \theta_2$, puis en soustrayant les deux équations obtenues, il vient

$$\sigma_{12}(\cos \theta_3 - \cos \theta_1 \cos \theta_2) = \sigma_{13}(\cos \theta_2 - \cos \theta_1 \cos \theta_3).$$

Grâce à la relation (D.1), on remarque

$$\begin{aligned}\cos \theta_2 &= \cos(2\pi - \theta_1 - \theta_3) = \cos \theta_1 \cos \theta_3 - \sin \theta_1 \sin \theta_3, \\ \cos \theta_3 &= \cos(2\pi - \theta_1 - \theta_2) = \cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2.\end{aligned}$$

Ainsi, on obtient

$$\frac{\sigma_{12}}{\sin \theta_3} = \frac{\sigma_{13}}{\sin \theta_2}.$$

Par permutation, on a finalement la relation suivante

$$\frac{\sigma_{12}}{\sin \theta_3} = \frac{\sigma_{13}}{\sin \theta_2} = \frac{\sigma_{23}}{\sin \theta_1},$$

appelée relation de Young.

De plus, en multipliant (D.2) par σ_{12} et (D.3) par σ_{13} , puis en additionnant les deux équations obtenues, il vient

$$2\sigma_{13}\sigma_{12}\cos \theta_1 = -\sigma_{12}^2 - \sigma_{13}^2 - \sigma_{23}(\sigma_{12}\cos \theta_2 + \sigma_{13}\cos \theta_3).$$

On utilise alors (D.4) pour avoir

$$\cos \theta_1 = \frac{\sigma_{23}^2 - \sigma_{12}^2 - \sigma_{13}^2}{2\sigma_{12}\sigma_{13}}. \quad (\text{D.5})$$

De même, les angles θ_2 et θ_3 vérifient

$$\cos \theta_2 = \frac{\sigma_{13}^2 - \sigma_{12}^2 - \sigma_{23}^2}{2\sigma_{12}\sigma_{23}}, \quad (\text{D.6})$$

$$\cos \theta_3 = \frac{\sigma_{12}^2 - \sigma_{13}^2 - \sigma_{23}^2}{2\sigma_{13}\sigma_{23}}. \quad (\text{D.7})$$

Des équations (D.5)-(D.7) on constate que les tensions de surface et les angles $\pi - \theta_1$, $\pi - \theta_2$ et $\pi - \theta_3$ sont reliés entre eux comme les côtés et les angles d'un triangle, appelé triangle de Neumann (figure D.2).

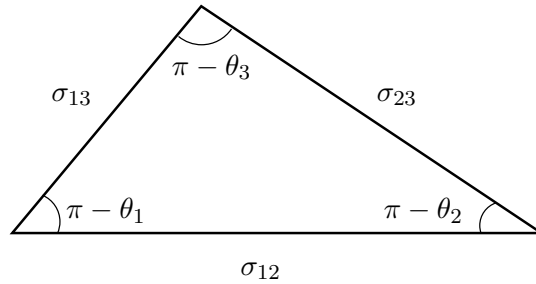


FIG. D.2 – Triangle de Neumann

Comme les tensions de surface forment les côtés d'un triangle, elles doivent satisfaire les inégalités suivantes

$$\begin{aligned}\sigma_{12} &< \sigma_{13} + \sigma_{23}, \\ \sigma_{13} &< \sigma_{12} + \sigma_{23}, \\ \sigma_{23} &< \sigma_{12} + \sigma_{13}.\end{aligned}$$

Pour qu'il existe des points triples à l'équilibre, il faut que ces inégalités soient satisfaites.

Si on considère le cas limite $\sigma_{12} = \sigma_{13} + \sigma_{23}$ alors les angles sont $\theta_1 = \theta_2 = \pi$ et $\theta_3 = 0$. Dans ce cas, la phase 3 s'étale totalement entre les phases 1 et 2.

On définit le coefficient S_i par

$$S_i = \sigma_{jk} - \sigma_{ij} - \sigma_{ik}, \text{ avec } (i, j, k) \text{ deux à deux distincts}$$

appelé paramètre d'étalement. Si S_i est négatif alors l'étalement est partiel et il y a existence des points triples à l'équilibre. Si S_i est positif ou nul l'étalement est total. La phase i s'étale entre les deux autres phases, il n'y a pas de points triples à l'équilibre (figure D.3).

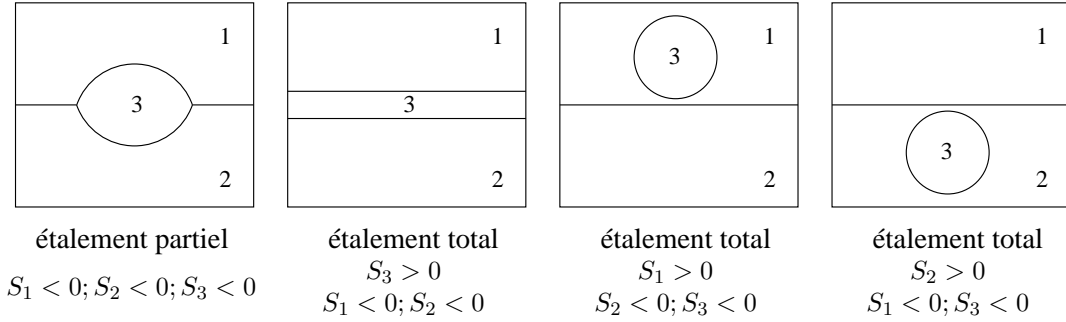


FIG. D.3 – Etalement partiel ou total d'une phase entre deux autres

Dans le cas d'un étalement partiel, nous avons vu comment les angles de contact sont liés avec les tensions de surface. Nous allons maintenant déterminer les positions des interfaces. A l'équilibre la lentille adopte une forme donnée par l'intersection de deux disques, notés \mathcal{C}_1 , \mathcal{C}_2 (figure D.4). Nous allons chercher les rayons des disques \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 ainsi que la position de leur centre.

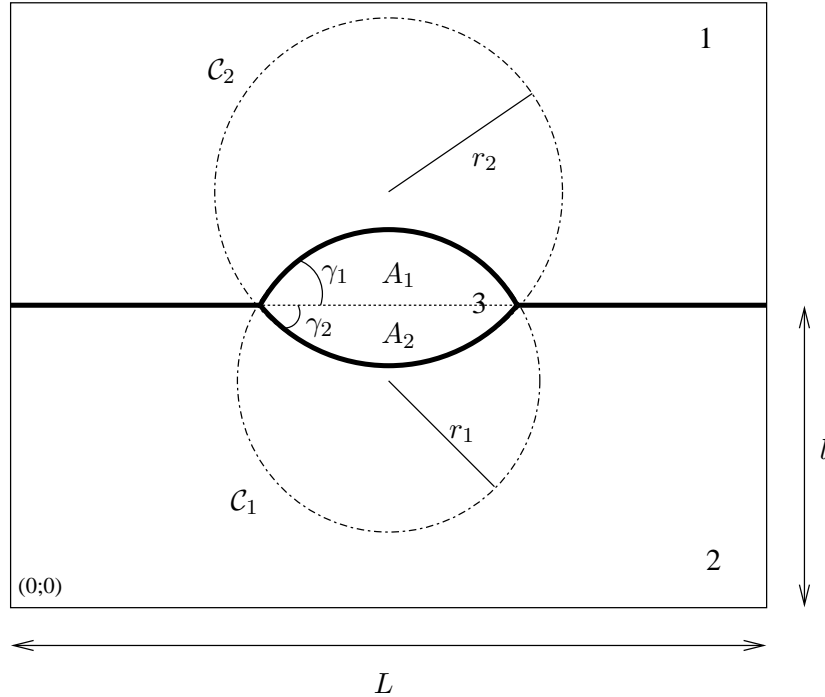


FIG. D.4 – Intersection des deux disques formant la lentille dans le cas d'un étalement partiel

On définit les angles γ_1 et γ_2 par $\gamma_1 = \pi - \theta_1$ et $\gamma_2 = \pi - \theta_2$ (figures D.1 et D.4). On introduit l la hauteur de la partie plane de l'interface entre la phase 1 et 2 et L la largeur du domaine. En supposant que la lentille est initialement sphérique, son aire est définie par

$$A = \pi r^2.$$

On note A_1 l'aire de la partie de la lentille qui est au-dessus de l'ordonnée l et A_2 celle en dessous de l'ordonnée l . On calcule l'aire A_i de la manière suivante (figure D.5)

$$A_i = \frac{\pi r_i^2 \gamma_i}{\pi} - 2(r_i \cos \gamma_i \cdot \frac{r_i \sin \gamma_i}{2}) = r_i^2(\gamma_i - \sin \gamma_i \cos \gamma_i). \quad (\text{D.8})$$

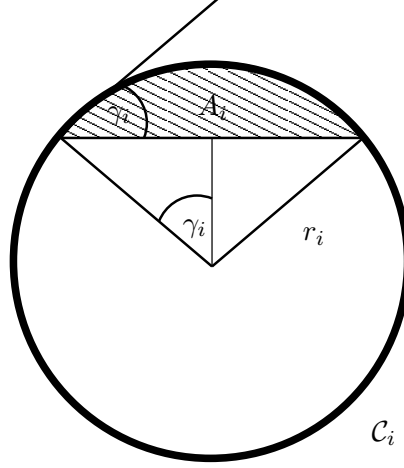


FIG. D.5 – Disque C_i formant une des deux parties de la lentille

On utilise alors la loi de Laplace (§IV.2 système (IV.1)) pour obtenir une relation entre les rayons r_1 et r_2 . Dans le cas de l'étalement partiel, les sauts de pression sont

$$\begin{aligned} p_1 - p_2 &= 0, \\ p_3 - p_1 &= \frac{\sigma_{13}}{r_1}, \\ p_3 - p_2 &= \frac{\sigma_{23}}{r_2}, \end{aligned}$$

ce qui entraîne

$$r_2 = \frac{\sigma_{23}}{\sigma_{13}} r_1. \quad (\text{D.9})$$

En utilisant (D.8) et (D.9) et en notant que $A = A_1 + A_2$, on obtient

$$\begin{cases} r_1 = \left(\frac{A}{\gamma_1 - \sin \gamma_1 \cos \gamma_1 + \frac{\sigma_{23}}{\sigma_{13}} (\gamma_2 - \sin \gamma_2 \cos \gamma_2)} \right)^{\frac{1}{2}}, \\ r_2 = \frac{\sigma_{23}}{\sigma_{13}} r_1. \end{cases}$$

Enfin, les coordonnées des centres des disques C_1 et C_2 sont respectivement $(\frac{L}{2}; h - r_1 \cos \gamma_1)$ et $(\frac{L}{2}; h + r_2 \cos \gamma_2)$.

Annexe E

Critères pour l'ascension d'une bulle dans un bain stratifié

On s'intéresse à l'ascension d'une bulle dans un bain stratifié. Lors de sa montée la bulle peut soit rester piégée dans l'interface liquide/liquide, soit pénétrer dans la phase légère. Lorsque la bulle a traversé l'interface, elle peut entraîner dans son sillage de la phase lourde dans la phase légère (figure E.1).

L'indice 1 réfère à la bulle, l'indice 2 à la phase lourde et l'indice 3 à la phase légère.

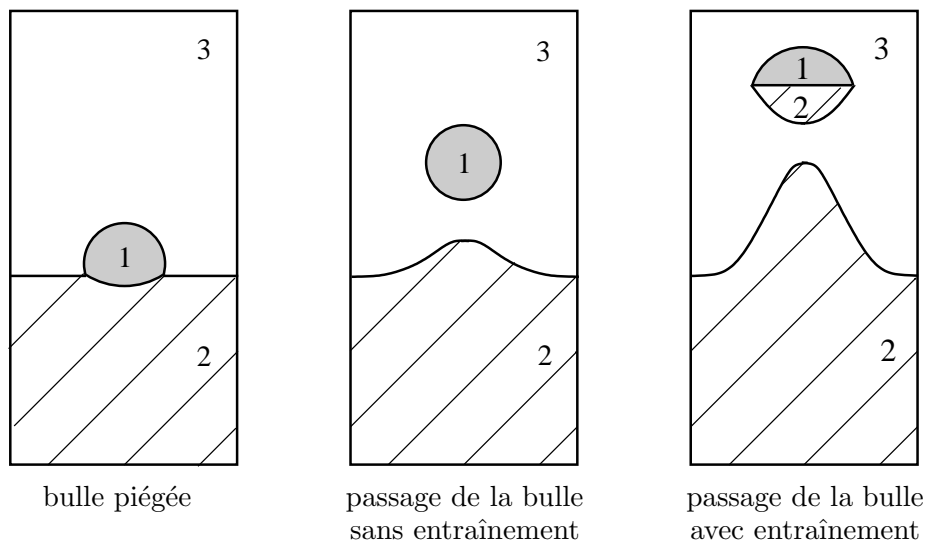


FIG. E.1 – Différents comportements d'une bulle dans un bain stratifié

Greene *et al.*[50] proposent des critères sur le volume minimal que doit avoir la bulle pour pénétrer dans la phase légère et pour entraîner de la phase lourde dans la phase légère. Pour établir ces critères, les auteurs supposent que

- l'écoulement est monodimensionnel dans la direction verticale ;
- les forces d'inertie et visqueuses sont négligées par rapport aux forces de flottabilité, et de tension de surface ;
- la symétrie est cylindrique autour de l'axe vertical.

Pour établir le critère sur le passage de la bulle, on suppose que celle-ci est soumise seulement à la force de flottabilité qui tend à la faire monter et à la force de tension de surface qui tend à la retenir dans l'interface.

La force de flottabilité décroît lorsque la bulle passe du liquide lourd au liquide léger tandis que la force de tension de surface augmente lorsque la bulle monte c'est-à-dire lorsque l'angle θ passe de 0 à $\frac{\pi}{2}$ sur la figure E.2.

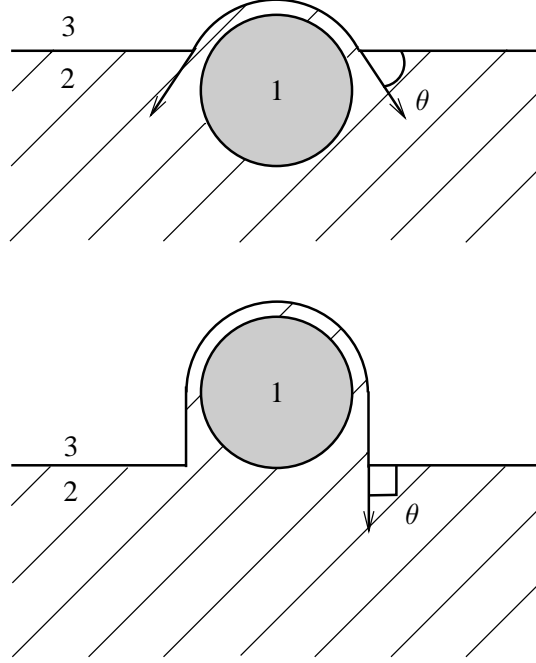


FIG. E.2 – Passage d'une bulle à travers une interface liquide/liquide

La bulle pénètre dans la phase légère si la force de flottabilité est plus importante que la force de tension de surface. Ainsi pour établir le critère, on considère la configuration où la force de flottabilité est minimale et la force de tension de surface est maximale c'est-à-dire $\theta = \frac{\pi}{2}$.

En notant V_1 le volume de la bulle, la force de flottabilité est égale à $(\varrho_3 - \varrho_1)V_1 g \vec{y}$. Calculons maintenant la contribution de la force de tension de surface, notée f_σ , où seulement la composante verticale intervient (figure E.3). En effet, la force de tension de surface se compense au niveau du cylindre entre deux points diamétralement opposés ainsi que sa composante horizontale au niveau de la demi-sphère. En notant A la surface où s'applique la force f_σ et r le rayon de la bulle, il vient

$$f_\sigma = \int_A \sigma_{23} \kappa (\vec{n} \cdot \vec{y}) \vec{y} ds = -\sigma_{23} \cdot \frac{2}{r} \cdot 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} r^2 \sin \theta \cos \theta \vec{y} d\theta = -2\pi \sigma_{23} r \vec{y}.$$

Finalement, la bulle pénètre dans la phase légère si

$$(\varrho_3 - \varrho_1)V_1 g - 2\pi \sigma_{23} r > 0.$$

Comme on considère une bulle sphérique, on a

$$V_1 = \frac{4}{3}\pi r^3,$$

ce qui entraîne

$$(\varrho_3 - \varrho_1)V_1 g - 2\pi \sigma_{23} \left(\frac{3}{4\pi} V_1 \right)^{\frac{1}{3}} > 0$$

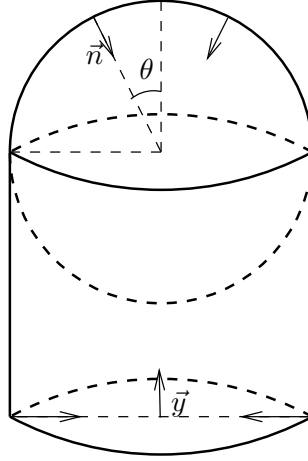


FIG. E.3 – Application de la force de tension de surface

c'est-à-dire

$$V_1 > \left(\frac{2\pi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \sigma_{23}}{(\varrho_3 - \varrho_1)g} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Par conséquent, la bulle pénètre dans la phase légère si son volume V_1 est supérieur à

$$V_p = \left(\frac{2\pi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \sigma_{23}}{(\varrho_3 - \varrho_1)g} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Dans [50], un deuxième critère portant encore sur le volume de la bulle est donné afin de prédire l'entraînement de la phase lourde dans la phase légère. Pour cela, on considère le système représenté sur la figure E.4. On note V_2 le volume du fluide lourd entraîné et r_2 le rayon de la colonne formée par le liquide lourd.

On suppose que la bulle et le liquide lourd entraîné sont soumis seulement à la force de flottabilité et à la force de tension de surface. Pour cette configuration, la force de flottabilité est égale à $(V_1(\varrho_3 - \varrho_1) - V_2(\varrho_2 - \varrho_3))g\vec{y}$. La force de tension de surface s'applique seulement sur le liquide lourd puisque la bulle a traversé l'interface.

Il y a entraînement lorsque la force de flottabilité est plus importante que la force de tension de surface qui est maximale lorsque l'angle β égale $\frac{\pi}{2}$ (figure E.4). En reprenant la même démarche que pour le critère précédent, la force de tension de surface est égale à $-2\pi\sigma_{23}r_2\vec{y}$.

On suppose que $V_2 \geq \frac{2}{3}\pi r_2^3$ lorsque $\beta = \frac{\pi}{2}$. D'après des observations expérimentales, le diamètre de la colonne est à peu près celui du diamètre de la projection de la bulle sur la surface au repos. On fait l'approximation suivante entre r_2 et V_1

$$r_2 = \left(\frac{3}{4\pi} V_1 \right)^{\frac{1}{3}} S,$$

où S est une fonction qui représente le rapport entre le diamètre de la projection de la bulle sur la surface au repos et celui de la sphère de volume équivalent

$S = 1$ pour une bulle sphérique,

$S > 1$ pour une bulle ayant la forme d'une calotte sphérique.

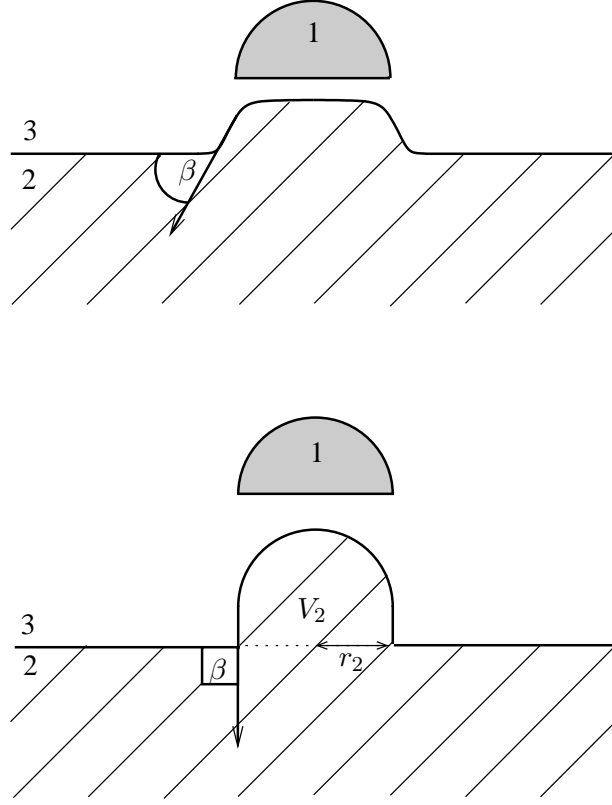


FIG. E.4 – Entraînement de la phase lourde par la bulle

Finalement, il y a entraînement si

$$(V_1(\varrho_3 - \varrho_1) - V_2(\varrho_2 - \varrho_3))g > 2\pi\sigma_{23}r_2.$$

En utilisant les relations entre r_2 , V_2 et V_1 précédentes, on a

$$V_1 > \left(\frac{2\pi\sigma_{23}(\frac{3}{4\pi})^{\frac{1}{3}}S}{g[\varrho_3 - \varrho_1 - \frac{S^{\frac{1}{3}}}{2}(\varrho_2 - \varrho_3)]} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Finalement, il y a entraînement de la phase lourde dans la phase légère si le volume de la bulle est supérieur à

$$V_{e,1} = \left(\frac{4\pi\sigma_{23}(\frac{3}{4\pi})^{\frac{1}{3}}}{g[3\varrho_3 - 2\varrho_1 - \varrho_2]} \right)^{\frac{3}{2}} \text{ pour } S = 1,$$

$$V_{e,S} = \left(\frac{2\pi\sigma_{23}(\frac{3}{4\pi})^{\frac{1}{3}}S}{g[\varrho_3 - \varrho_1 - \frac{S^{\frac{1}{3}}}{2}(\varrho_2 - \varrho_3)]} \right)^{\frac{3}{2}} > V_{e,1} \text{ pour } S > 1.$$

Annexe F

Paramètres physiques et numériques des simulations présentées

Dans cette annexe, nous listons les paramètres physiques et numériques pour les simulations présentées dans ce document.

Pour chaque figure, nous précisons tout d'abord le domaine de calcul, la géométrie qui peut être cartésienne ou axisymétrique, l'initialisation des paramètres d'ordre et les conditions au bord (figure F.1). Les autres inconnues sont initialisées à 0 sauf dans certain cas où ce sera mentionné. Nous donnons ensuite les paramètres physiques utilisés dans la simulation qui sont selon les études :

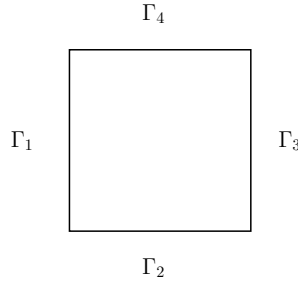


FIG. F.1 – Domaine d'étude

- les tensions de surface $[\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}]$ en N.m^{-1} ,
- les masses volumiques $[\varrho_1, \varrho_2, \varrho_3]$ en kg.m^{-3} ,
- les viscosités $[\eta_1, \eta_2, \eta_3]$ en Pa.s ,
- les chaleurs massiques $[c_{p1}, c_{p2}, c_{p3}]$ en $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$,
- les conductivité thermiques $[\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3]$ en $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$.

Enfin, nous détaillons les paramètres numériques :

- le pas de maillage $[h]$ en m,
- le pas de temps $[\Delta t]$ en s,
- l'épaisseur d'interface $[\varepsilon]$ en m,
- la définition de la mobilité [mobilité] (constante ou dégénérée) notée

CTE si $M_0 = M$,

DEG-EXPL si $M_0^n = M_0(\mathbf{c}^n) = M(1 - c_1^n)^2(1 - c_2^n)^2(1 - c_3^n)^2$,

DEG-IMPL si $M_0^{n+1} = M_0(\mathbf{c}^{n+1}) = M(1 - c_1^{n+1})^2(1 - c_2^{n+1})^2(1 - c_3^{n+1})^2$,

- le coefficient M $[M]$,

- le potentiel de Cahn-Hilliard F $[F]$ noté

$$\begin{aligned}
 F_0 & \quad \text{si } F = F_0 = \frac{\Sigma_1}{2}c_1^2(1-c_1)^2 + \frac{\Sigma_2}{2}c_2^2(1-c_2)^2 + \frac{\Sigma_3}{2}c_3^2(1-c_3)^2, \\
 \tilde{F}_0 & \quad \text{si } F = \tilde{F}_0 = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2, \\
 \tilde{F}_0 \text{ ternaire} & \quad \text{si } F = \tilde{F}_0 \text{ et résolution du modèle (I.39) proposé dans [70],} \\
 F_\Lambda & \quad \text{si } F = F_{\Lambda,0} = F_0 + P = F_0 + 3\Lambda c_1^2c_2^2c_3^2,
 \end{aligned}$$

- la discrétisation en temps des dérivées partielles de F_0 dans les équations de Cahn-Hilliard [discr. F_0] notée

IMPL lorsqu'on résout les équations (III.24) avec $F = F_0$ ou $F = \tilde{F}_0$,
 SEMI-IMPL lorsqu'on résout les équations (III.25) et $F = F_0$,

- la discrétisation en temps des dérivées partielles de $F_{\Lambda,0}$ dans les équations de Cahn-Hilliard [discr. F_Λ] notée

IMPL lorsqu'on résout les équations (III.24) avec $F = F_{\Lambda,0}$,
 SEMI-IMPL lorsqu'on résout les équations (III.40) et $F = F_{\Lambda,0}$,

- la méthode de résolution des équations de Navier-Stokes [méthode NS] notée
 AL lorsqu'on utilise la méthode de Lagrangien augmenté décrite dans le paragraphe III.3.2.a,
 IP $_{\mathbf{L}}$ lorsqu'on utilise la méthode de projection incrémentale décrite dans le paragraphe III.3.2.b, en approchant $\mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}^T$ par \mathbf{L}
 IP $_{\mathbf{M}_l}$ lorsqu'on utilise la méthode de projection incrémentale décrite dans le paragraphe III.3.2.b, en approchant $\mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}^T$ par $\mathbf{B}\mathbf{M}_l^{-1}\mathbf{B}^T$
 PP $_{\mathbf{L}}$ lorsqu'on utilise la méthode de pénalité-projection décrite dans le paragraphe III.3.2.c, en approchant $\mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}^T$ par \mathbf{L}
 PP $_{\mathbf{M}_l}$ lorsqu'on utilise la méthode de pénalité-projection décrite dans le paragraphe III.3.2.c, en approchant $\mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}^T$ par $\mathbf{B}\mathbf{M}_l^{-1}\mathbf{B}^T$
- le paramètre d'augmentation r [r].

Les termes entre crochets correspondent aux désignations utilisées dans la suite.

Nous résolvons le système de Cahn-Hilliard avec les inconnues (c_1, c_2, μ_1, μ_2) , le couple (c_3, μ_3) est calculé par

$$c_3 = 1 - c_1 - c_2, \quad \mu_3 = - \left(\frac{\Sigma_3}{\Sigma_1} \mu_1 + \frac{\Sigma_3}{\Sigma_2} \mu_2 \right).$$

F.1 Paramètres des résultats du Chapitre 1

• page 36, Figure I.4

Initialisation :

domaine	$[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot \mathbf{n} = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot \mathbf{n} = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
1	1	1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0
$8.3 \cdot 10^{-3}$	1	$2.5 \cdot 10^{-3}$	CTE	10^{-9}	F_0	IMPL

• page 37, Figure I.5

Initialisation :

domaine	$[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
1	1	1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0
$8.3 \cdot 10^{-3}$	1	$4 \cdot 10^{-4}$	CTE	$1.3 \cdot 10^{-2}$	\tilde{F}_0 ternaire	IMPL
$8.3 \cdot 10^{-3}$	1	$2.5 \cdot 10^{-3}$	CTE	10^{-9}	\tilde{F}_0 F_0	IMPL

• page 37, Figure I.6

Initialisation :

domaine	$[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
1	1	1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0
$8.3 \cdot 10^{-3}$	1	$2.5 \cdot 10^{-3}$	CTE	10^{-9}	\tilde{F}_0	IMPL
$5.5 \cdot 10^{-3}$						

• page 45, Figure I.8

Initialisation :

domaine	$[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
3	1	1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_Λ
$8.3 \cdot 10^{-3}$	0.02	$2.5 \cdot 10^{-3}$	CTE	$5.3 \cdot 10^{-9}$	$F_{\Lambda=7}$	IMPL

• page 45, Figure I.9

Initialisation :

domaine	$[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
3	1	1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	discr. F_Λ
$8.3 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$2.5 \cdot 10^{-3}$	CTE	$2.7 \cdot 10^{-10}$	F_0 $F_{\Lambda=7}$	IMPL	IMPL

• page 47, Figure I.10

Initialisation :

domaine	$[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
1	0.5	0.55

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	discr. F_Λ
$8.3 \cdot 10^{-3}$	1	$2.5 \cdot 10^{-3}$	CTE	10^{-9}	F_0 $F_{\Lambda=7}$	IMPL	IMPL

F.2 Paramètres des résultats du Chapitre 3

• page 90, Figure III.1

Initialisation :

domaine	$[0; 8.4 \cdot 10^{-3}] \times [0; 6.3 \cdot 10^{-2}]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 1.05 \cdot 10^{-2})^2} - 4.2 \cdot 10^{-3}) \right)$
phase légère	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} (z - 2.94 \cdot 10^{-2}) \right)$
phase lourde	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.1	1	1000	1500	10^{-4}	0.1	0.15

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$3 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$6.3 \cdot 10^{-4}$	DEG-IMPL	$2.1 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	$\text{PP}_{\mathbf{L}}$	1
	10^{-4}					SEMI-IMPL		
						IMPL		
						SEMI-IMPL		

• page 97, Figure III.2

Initialisation :

domaine	$[0; 8.4 \cdot 10^{-3}] \times [0; 6.3 \cdot 10^{-2}]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 1.05 \cdot 10^{-2})^2} - 4.2 \cdot 10^{-3}) \right)$
phase légère	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} (z - 2.94 \cdot 10^{-2}) \right)$
phase lourde	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.1	1	1000	1500	10^{-4}	0.1	0.15

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_Λ	méthode NS	r				
$3 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$6.3 \cdot 10^{-4}$	DEG-IMPL	$2.1 \cdot 10^{-5}$	$F_{\Lambda=\frac{1}{3}}$	IMPL	PP _L	1				
	10^{-4}					SEMI-IMPL						
						IMPL						
						SEMI-IMPL						

• page 98, Figure III.3 et Figure III.4

Initialisation :

domaine	$[10^{-5}; 1.25 \cdot 10^{-2}] \times [0; 7 \cdot 10^{-2}]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 1.75 \cdot 10^{-2})^2} - 5 \cdot 10^{-3}) \right)$
huile	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} (z - 3 \cdot 10^{-2}) \right)$
eau	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.02	0.07	0.03	1.29	970	1000	$1.85 \cdot 10^{-5}$	0.05	0.001

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M
$2 \cdot 10^{-4} \leq h \leq 6 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	DEG-IMPL	$6.7 \cdot 10^{-5}$

F	discr. F_Λ	méthode NS	r
$F_{\Lambda=\frac{10}{3}}$	SEMI-IMPL	PP _L	100

Le maillage est plus fin autour de l'interface liquide/liquide ($0.04 \leq z \leq 0.055$) et dans la colonne $0 \leq r \leq 0.008$.

• page 104, Figure III.5

Initialisation :

domaine	$[-8.5 \cdot 10^{-3}; 8.5 \cdot 10^{-3}] \times [0; 0.034]$
géométrie	2D cartésienne
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{x^2 + (y - 8.5 \cdot 10^{-3})^2} - 4.25 \cdot 10^{-3}) \right)$
	$c_2 = 0$
phase liquide	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$ et $u = 0$ sur $\Gamma_2 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$1.29 \cdot 10^{-3}$	0.129	0.129

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$3.4 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$6.8 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$2 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	AL	500

• page 105, Figure III.6

Initialisation :

domaine	$[-8.5 \cdot 10^{-3}; 8.5 \cdot 10^{-3}] \times [0; 0.034]$
géométrie	2D cartésienne
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{x^2 + (y - 8.5 \cdot 10^{-3})^2} - 4.25 \cdot 10^{-3}) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} (y - 2.55 \cdot 10^{-2}) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$ et $u = 0$ sur $\Gamma_2 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	900	1000	$1.29 \cdot 10^{-3}$	0.129	0.129

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$5.6 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$6.8 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$2 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	AL	500

• page 112, Figure III.7; page 113, Figure III.8

Initialisation :

domaine	$[0; 4 \cdot 10^{-3}] \times [0; 8 \cdot 10^{-3}]$
géométrie	2D cartésienne
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{(x - 2 \cdot 10^{-3})^2 + (y - 2 \cdot 10^{-3})^2} - 7.9 \cdot 10^{-4}) \right)$
phase liquide	$c_2 = 0$
conditions au bord	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$ $\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$ et $u = 0$ sur $\Gamma_2 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$4.58 \cdot 10^{-4}$	0.0458	0.0458

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
10^{-4}	10^{-3}	$2 \cdot 10^{-4}$	DEG-EXPL	$1.3 \cdot 10^{-6}$	F_0	IMPL	AL	100
							IP _{M_l}	
							IP _L	
							PP _L	1
							PP _{M_l}	100
							PP _L	100

• page 115, Figure III.10

Initialisation :

domaine	$[0; 7.65 \cdot 10^{-2}] \times [0; 1.275 \cdot 10^{-2}]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 1.275 \cdot 10^{-2})^2} - 4.25 \cdot 10^{-3}) \right)$
	$c_2 = 0$
liquide	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$, $u = 0$ sur Γ_2 et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$1.29 \cdot 10^{-3}$	$1.29 \cdot 10^{-1}$	$1.29 \cdot 10^{-1}$

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M
$2.6 \cdot 10^{-4} \leq h \leq 6.8 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$5 \cdot 10^{-4}$	DEG-EXPL	$2.7 \cdot 10^{-5}$

F	discr. F_0	méthode NS	r
F_0	IMPL	PP \mathbf{M}_l	10

Le maillage est plus fin dans la colonne $0 \leq r \leq 0.0068$.

• page 116, Figure III.11

Initialisation :

domaine	$[0; 1] \times [0; 1]$
géométrie	2D cartésienne
ellipse	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{\frac{1}{0.12}(x - 0.5)^2 + \frac{1}{0.4}(y - 0.5)^2} - 0.4) \right)$
	$c_2 = 0$
	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
1	1	1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0
$1.4 \cdot 10^{-2}$	1	0.028	DEG-EXPL	$4.7 \cdot 10^{-3}$	F_0	IMPL

• page 116, Figure III.12

Initialisation :

domaine	$[0; 1] \times [0; 1]$
géométrie	2D cartésienne
ellipse	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} \left(\sqrt{\frac{1}{0.12}(x-0.5)^2 + \frac{1}{0.4}(y-0.5)^2} - 0.4 \right) \right)$
	$c_2 = 0$
	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
1	1	1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0
$1.4 \cdot 10^{-2}$	1	0.028	DEG-EXPL	$4.7 \cdot 10^{-3}$	F_0	IMPL
				$4.7 \cdot 10^{-4}$		
				$4.7 \cdot 10^{-5}$		

• page 117, Figure III.13

Initialisation :

domaine	$[0; 9.75 \cdot 10^{-2}] \times [0; 5.85 \cdot 10^{-1}]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} \left(\sqrt{r^2 + (z - 9.75 \cdot 10^{-2})^2} - 3.25 \cdot 10^{-2} \right) \right)$
	$c_2 = 0$
	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
liquide	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$
conditions au bord	$u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$, $u = 0$ sur Γ_2 et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$1.53 \cdot 10^{-2}$	1.53	1.53

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M
$2 \cdot 10^{-3} \leq h \leq 5.2 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$3.9 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$3.4 \cdot 10^{-4}$
				$3.4 \cdot 10^{-5}$
				$3.4 \cdot 10^{-6}$
				$3.4 \cdot 10^{-7}$

F	discr. F_0	méthode NS	r
F_0	IMPL	PP \mathbf{M}_l	10

Le maillage est plus fin dans la colonne $0 \leq r \leq 0.052$.

• page 118, Figure III.14

Initialisation :

domaine	$[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
1	1	1	1	1	1	1	1	1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$1.4 \cdot 10^{-3}$								
10^{-3}	10^{-3}	$2.8 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$4.7 \cdot 10^{-7}$	F_0	IMPL	AL	100
$8.3 \cdot 10^{-4}$								
$7.1 \cdot 10^{-4}$								

• page 118, Figure III.15

Initialisation :

domaine	$[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
1	1	1	1	1	1	1	1	1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
10^{-3}		$3 \cdot 10^{-3}$						
$8.3 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$2.5 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$6 \cdot 10^{-7}$	F_0	IMPL	AL	100
$7.1 \cdot 10^{-4}$		$2.1 \cdot 10^{-3}$						

F.3 Paramètres des résultats du Chapitre 4

• page 123, Figure IV.2 ; page 125, Figure IV.4 ; page 125, Figure IV.5 ; page 126, Figure IV.6 ; page 127, Figure IV.7

- "Dimpled"

Initialisation :

domaine	$[0; 4.95 \cdot 10^{-2}] \times [0; 2.97 \cdot 10^{-1}]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 4.95 \cdot 10^{-2})^2} - 1.65 \cdot 10^{-2}) \right)$
	$c_2 = 0$
liquide	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$, $u = 0$ sur Γ_2 et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$3.24 \cdot 10^{-2}$	3.24	3.24

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M
$10^{-3} \leq h \leq 2.6 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$3.9 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$6.7 \cdot 10^{-4}$

F	discr. F_0	méthode NS	r
F_0	IMPL	PP \mathbf{M}_l	10

Le maillage est plus fin dans la colonne $0 \leq r \leq 0.0264$.

- "Ellipsoidal"

Initialisation :

domaine	$[0; 1.275 \cdot 10^{-2}] \times [0; 7.65 \cdot 10^{-2}]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 1.275 \cdot 10^{-2})^2} - 4.25 \cdot 10^{-3}) \right)$
	$c_2 = 0$
liquide	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$, $u = 0$ sur Γ_2 et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$1.29 \cdot 10^{-3}$	0.129	0.129

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M
$2.6 \cdot 10^{-4} \leq h \leq 6.8 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$5.1 \cdot 10^{-4}$	DEG-EXPL	$2.6 \cdot 10^{-5}$

F	discr. F_0	méthode NS	r
F_0	IMPL	PP \mathbf{M}_l	10

Le maillage est plus fin dans la colonne $0 \leq r \leq 6.8 \cdot 10^{-3}$.

- "Skirted"

Initialisation :

domaine	$[0; 9.75 \cdot 10^{-2}] \times [0; 5.85 \cdot 10^{-1}]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 9.75 \cdot 10^{-2})^2} - 3.25 \cdot 10^{-2}) \right)$
	$c_2 = 0$
liquide	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$, $u = 0$ sur Γ_2 et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$1.53 \cdot 10^{-2}$	1.53	1.53

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M
$2 \cdot 10^{-3} \leq h \leq 5.2 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$3.9 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$3.4 \cdot 10^{-5}$

F	discr. F_0	méthode NS	r
F_0	IMPL	PP $_{M_l}$	10

Le maillage est plus fin dans la colonne $0 \leq r \leq 0.052$.

• page 124, Figure IV.3

Initialisation :

domaine	$[0; 9.75 \cdot 10^{-2}] \times [0; 5.85 \cdot 10^{-1}]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 9.75 \cdot 10^{-2})^2} - 3.25 \cdot 10^{-2}) \right)$
	$c_2 = 0$
liquide	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$, $u = 0$ sur Γ_2 et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$1.53 \cdot 10^{-2}$	1.53	1.53

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M
$2 \cdot 10^{-3} \leq h \leq 5.2 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$3.9 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$3.4 \cdot 10^{-4}$
				$3.4 \cdot 10^{-5}$
				$3.4 \cdot 10^{-6}$
				$3.4 \cdot 10^{-7}$

F	discr. F_0	méthode NS	r
F_0	IMPL	PP $_{M_l}$	10

Le maillage est plus fin dans la colonne $0 \leq r \leq 0.052$.

• page 129, Figure IV.8 ; page 129, Figure IV.9

Initialisation :

domaine	$[0; 0.072] \times [0; 0.432]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 0.072)^2} - 0.024) \right)$
	$c_2 = 0$
liquide	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$, $u = 0$ sur Γ_2 et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$5.4 \cdot 10^{-5}$	$5.4 \cdot 10^{-3}$	$5.4 \cdot 10^{-3}$

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$9 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$3.2 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$4 \cdot 10^{-4}$	F_0	IMPL	PP $_{M_l}$	10

• page 130, Figure IV.10 ; page 130, Figure IV.11

Initialisation :

domaine	$[0; 0.072] \times [0; 0.432]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	calotte*
	$c_2 = 0$
liquide	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3$, $u = 0$ sur Γ_2 et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

* Pour initialiser la bulle sous la forme d'une calotte, on prend le résultat obtenu à $t = 0.25$ d'un calcul où la bulle est initialement sphérique. On fait varier la viscosité de manière linéaire suivant z . On prend $\eta_3 = 0.5$ à $z = 0$ et $\eta_3 = 5.4 \cdot 10^{-3}$ à $z = 0.24$. Pour $z > 0.24$ on a $\eta_3 = 5.4 \cdot 10^{-3}$.

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.07	1	1	1000	$5.4 \cdot 10^{-5}$	$5.4 \cdot 10^{-3}$	$5.4 \cdot 10^{-3}$

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$9 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$3.2 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$4 \cdot 10^{-4}$	F_0	IMPL	PP $_{M_l}$	10

- page 132, Figure IV.14 ; page 133, Figure IV.15 ; page 133, Figure IV.16

Initialisation :

domaine	$[0; 0.08] \times [0; 0.1]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
1	0.08	1.4						
1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	0.6	0.6						

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$8.3 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$2.8 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$4.8 \cdot 10^{-7}$	F_0	IMPL	AL	100

- page 133, Tableau IV.3

Initialisation :

domaine	$[0; 0.08] \times [0; 0.1]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x - 0.05)^2 + (y - 0.05)^2} - 0.012, y - 0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
1	0.08	1.4						
1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	0.6	0.6						

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$1.4 \cdot 10^{-3}$								
10^{-3}								
$8.3 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$2.8 \cdot 10^{-3}$	DEG-EXPL	$4.8 \cdot 10^{-7}$	F_0	IMPL	AL	100
$7 \cdot 10^{-3}$								

• page 134, Figure IV.17

Initialisation :

domaine	$[0; 0.1] \times [0.02; 0.08]$
géométrie	2D cartésienne
phase supérieure	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \min(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
phase inférieure	$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{\varepsilon} \max(\sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.012, y-0.05) \right)$
lentille	$c_3 = 1 - c_1 - c_2$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
3	1	1
1	1	3

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_Λ
$8.3 \cdot 10^{-3}$	0.02	$2.5 \cdot 10^{-3}$	CTE	$5.3 \cdot 10^{-9}$	$F_{\Lambda=7}$	IMPL

• page 137, Figure IV.20 ; page 137, Tableau IV.5

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.002$ $r_b = 0.0025$ $r_b = 0.0026$ $r_b = 0.0027$ $r_b = 0.0028$ $r_b = 0.0029$
domaine	$[0; 2r_b] \times [0; 20r_b]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z-2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 8r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.05	1	1200	1000	10^{-4}	0.15	0.1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	DEG-EXPL	$1.1 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

• page 138, Tableau IV.6

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.003$ $r_b = 0.004$ $r_b = 0.005$ $r_b = 0.006$
domaine géométrie	$[0; 2r_b] \times [0; 20r_b]$ 3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 8r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.05	1	1200	1000	10^{-4}	0.15	0.1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	DEG-EXPL	$1.1 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

• page 138, Tableau IV.7

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.003$ $r_b = 0.004$ $r_b = 0.005$ $r_b = 0.006$
domaine géométrie	$[0; 2r_b] \times [0; 20r_b]$ 3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 8r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.05	1	1200	1000	10^{-4}	0.15	0.1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	DEG-EXPL	$1.1 \cdot 10^{-7}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

• page 140, Figure IV.21 ; page 141, Figure IV.22

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.008$
domaine	$[0; 2r_b] \times [0; 20r_b]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 8r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.05	1	1200	1000	10^{-4}	0.15	0.1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	DEG-EXPL	$1.1 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

• page 141, Figure IV.23

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.008$
domaine	$[0; 2r_b] \times [0; 20r_b]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 8r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
				1100				
0.07	0.07	0.05	1	1200	1000	10^{-4}	0.15	0.1
				1300				

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	DEG-EXPL	$1.1 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

• page 141, Figure IV.24

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.008$
domaine	$[0; 2r_b] \times [0; 20r_b]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 8r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.05	1	1200	900	10^{-4}	0.15	0.1
					1100			

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	DEG-EXPL	$1.1 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

• page 142, Figure IV.25

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.008$
domaine	$[0; 2r_b] \times [0; 20r_b]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 8r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.05	1	1200	1000	10^{-4}	0.1	0.1
							0.2	

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	DEG-EXPL	$1.1 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

• page 142, Figure IV.26

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.008$
domaine	$[0; 2r_b] \times [0; 20r_b]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 8r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.05	1	1200	1000	10^{-4}	0.15	0.1
								0.2

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	DEG-EXPL	$1.1 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

• page 145, Figure IV.28 ; page 146, Figure IV.29 ; page 147, Figure IV.30

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.004$ $r_b = 0.008$
domaine	$[0; 2r_b] \times [0; 20r_b]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 10r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.05	1	1200	1000	10^{-4}	0.15	0.1

λ_1	λ_2	λ_3	c_{p1}	c_{p2}	c_{p3}
0.29	30	3	2800	600	600

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	DEG-EXPL	$1.1 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

• page 149, Figure IV.32 ; page 149, Figure IV.33 ; page 151, Figure IV.36 ; page 150, Figure IV.35

Initialisation :

domaine	$[0; 0.008] \times [0; 0.08]$
géométrie	3D axisymétrique
phase gazeuse	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 1.08 \cdot 10^{-2})} - 0.004) \right)$
phase lourde	$+ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{(r + 0.0082)^2 + z^2} - 0.01) \right)$
phase légère	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
conditions au bord	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 0.04) \right)$
	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$
	$M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0, c_1 = c_{1D}, c_2 = 1 - c_{1D}, c_3 = 0$ sur Γ_2
	$(-pn + 2\eta D(u)n) \cdot t = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_3, -pn + 2\eta D(u)n = 0$ sur Γ_4
	$u = \begin{cases} u_e & \text{si } r < r_\alpha, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$ sur Γ_2

avec $c_{1D} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{(r + 0.0082)^2 + z^2} - 0.01) \right)$, $r_\alpha = 1.2 \cdot 10^{-3}$ et $u_e = (0, 0.4)$.

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
0.07	0.07	0.05	1	1200	1000	10^{-4}	0.15	0.1

λ_1	λ_2	λ_3	c_{p1}	c_{p2}	c_{p3}
0.29	30	3	2800	600	600

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M	F	discr. F_0	méthode NS	r
$\frac{r_b}{14}$	10^{-3}	$\frac{r_b}{7}$	EXPL*	$2.2 \cdot 10^{-5}$	F_0	IMPL	PP _L	1000

* La mobilité dépend des paramètres d'ordre mais elle est strictement positive. On prend une mobilité dégénérée à laquelle on ajoute $0.001M$.

• page 155, Figure IV.37

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.003$
domaine	$r_b = 0.004$
géométrie	$[10^{-5}; 3r_b] \times [0; 12r_b]$
bulle	3D axisymétrique
phase lourde	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 3r_b)} - r_b) \right)$
phase légère	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
conditions au bord	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 6r_b) \right)$
	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$
	$u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
1.3	0.8	1	0.1	7800	4000	$7.3 \cdot 10^{-5}$	0.1	0.1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M
$0.1r_b \leq h \leq 0.07r_b$	$5 \cdot 10^{-5}$	$0.15r_b$	DEG-IMPL	$2 \cdot 10^{-5}$

F	discr. F_0	méthode NS	r
F_0	IMPL	PP _L	5000

Le maillage est plus fin dans la colonne $0 \leq r \leq 2r_b$.

• page 155, Figure IV.38

Initialisation :

rayon	$r_b = 0.011$
domaine	$[10^{-5}; 3r_b] \times [0; 15r_b]$
géométrie	3D axisymétrique
bulle	$c_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (\sqrt{r^2 + (z - 2.5r_b)} - r_b) \right)$
phase lourde	$c_2 = 1 - c_1 - c_3$
phase légère	$c_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-\frac{2}{\varepsilon} (z - 7r_b) \right)$
conditions au bord	$\nabla c_i \cdot n = M_0(\mathbf{c}) \nabla \mu_i \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ $u \cdot n = 0$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ et $2\eta D(u)n - pn = 0$ sur Γ_4

Paramètres physiques :

σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}	ϱ_1	ϱ_2	ϱ_3	η_1	η_2	η_3
1.3	0.8	1	0.1	7800	4000	$7.3 \cdot 10^{-5}$	0.1	0.1

Paramètres numériques :

h	Δt	ε	mobilité	M
$0.1r_b \leq h \leq 0.07r_b$	$5 \cdot 10^{-5}$	$0.15r_b$	DEG-IMPL	$2 \cdot 10^{-5}$

F	discr. F_0	méthode NS	r
F_0	IMPL	PP _L	5000

Le maillage est plus fin dans la colonne $0 \leq r \leq 2r_b$.

Bibliographie

- [1] Y. Achdou, O. Pironneau, and F. Valentin. Effective boundary conditions for laminar flows over periodic rough boundaries. *Journal of Computational Physics*, 147 :187–218, 1998.
- [2] S. Agmon. *Lectures on elliptic boundary value problems*, volume 2 of *Mathematical Studies*. D. Van Nostrand Co. Inc., Princeton, N.J.-Toronto-London, 1965.
- [3] D.M. Anderson, G.B. McFadden, and A.A. Wheeler. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30 :139–165, 1998.
- [4] F. Babik, L. Gastaldo, R. Herbin, and J.-C. Latche. An unconditionally stable pressure correction scheme for barotropic compressible Navier-Stokes equations. In *European Conference on Computational Fluid Dynamics*, Egmond aan Ze, Pays-bas, 2006.
- [5] V.E. Badalassi, H.D. Cenicerros, and S. Banerjee. Computation of multiphase systems with phase field models. *Journal of Computational Physics*, 190(2) :371–397, 2003.
- [6] M. Barrachin. Methodology of calculation for the corium-concrete mixtures properties (density, viscosity, thermal conductivity). Technical report, IRSN/DPAM/SEMIC, 2006.
- [7] J.W. Barrett and J.F. Blowey. An error bound for the finite element approximation of a model for phase separation of a multi-component alloy. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 16 :257–287, 1996.
- [8] J.W. Barrett and J.F. Blowey. Finite element approximation of a model for phase separation of a multi-component alloy with a concentration dependant mobility matrix. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 18 :287–328, 1998.
- [9] J.W. Barrett and J.F. Blowey. Finite element approximation of a model for phase separation of a multi-component alloy with non-smooth free energy and a concentration dependent mobility matrix. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 9 :627–663, 1999.
- [10] J.W. Barrett and J.F. Blowey. An improved error bound for a finite element approximation of a model for phase separation of a multi-component alloy. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 19 :147–168, 1999.
- [11] T. Belytschko, N. Moës, S. Usui, and C. Parimi. Arbitrary discontinuities in finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50 :993–1013, 2001.
- [12] J.F. Blowey, M.I.M. Copetti, and C.M. Elliott. Numerical analysis of a model for phase separation of a multi-component alloy. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 16 :111–139, 1996.
- [13] A. Bonfoh and Miranville A. On Cahn-Hilliard-Gurtin equations. *Nonlinear Analysis*, 47 :3455–3466, 2001.

-
- [14] F. Boyer. Mathematical study of multiphase flow under shear through order parameter formulation. *Asymptotic analysis*, 20(2) :175–212, 1999.
 - [15] F. Boyer. A theoretical and numerical model for the study of incompressible mixture flows. *Computers and Fluids*, 31(1) :41–68, 2002.
 - [16] F. Boyer and P. Fabrie. *Eléments d’analyse pour l’étude de quelques modèles d’écoulements de fluides visqueux incompressibles*, volume 52 of *Mathématiques et Applications*. Springer, 2006.
 - [17] F. Boyer and C. Lapuerta. Study of a three component Cahn-Hilliard flow model. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 40(4) :653–687, 2006.
 - [18] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100 :335–354, 1992.
 - [19] H. Brezis. *Analyse Fonctionnelle*. Masson, Paris, 1983.
 - [20] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Number 15 in Springer Series in Computational Mathematics. Springer-Verlag, 1991.
 - [21] J.W. Cahn. On spinodal decomposition. *Acta Metallurgica*, 9 :795–801, 1961.
 - [22] J.W. Cahn and J.E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system : I. interfacial free energy. *Journal of Chemical Physics*, 28(2) :258–267, 1958.
 - [23] P.-R. Cha, D.-H. Yeon, and J.-K. Yoon. Phase-field model for multicomponent alloy solidification. *Journal of Crystal Growth*, 274(1-2) :281–293, 2005.
 - [24] R. Chella and J. Viñals. Mixing of two-phase fluid by cavity flow. *Physical Review E*, 53(4) :3832–3840, 1996.
 - [25] L. Chen, S.V. Garimella, J.A. Reizes, and E. Leonardi. The development of a bubble rising in a viscous liquid. *Journal of Fluid Mechanics*, 387 :61–96, 1999.
 - [26] R. Clift, J.R. Grace, and E. Weber. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978.
 - [27] M.I.M. Copetti. Numerical experiments of phase separation in ternary mixtures. *Mathematics and Computers in Simulation*, 52 :41–51, 2000.
 - [28] J. Cranga. *Simulation numérique directe d’écoulements di- et tri-phasiques engendrés par l’injection de bulles dans un bain de métal liquide*. Mécanique de fluides, Institut National Polytechnique de Toulouse, nov 2002.
 - [29] M. Cranga, R. Fabianelli, F. Jacq, M. Barrachin, and F. Duval. The MEDICIS code, a versatile tool for MCCI modelling. In *ICAPP international Congress*, Séoul - Corée, 2005.
 - [30] T.A. Davis. Algorithm 832 : Umfpack — an unsymmetric-pattern multifrontal method. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 30(2) :196–199, 2004.
 - [31] A.R. Deemer and J.C. Slattey. Balance equations and structural models for phase interfaces. *International Journal of Multiphase Flow*, 4 :171–192, 1978.
 - [32] W.M. Deen. *Analysis of Transport Phenomena*. Oxford University Press, 1998.
 - [33] K. Deimling. *Nonlinear functional analysis*. Springer-Verlag, 1985.

- [34] C.M. Elliott. The Cahn-Hilliard model for the kinetics of phase separation. In J.F. Rodrigues, editor, *Mathematical Models for Phase Change Problems*, volume 88 of *International Series of Numerical Mathematics*. Birkhäuser Verlag Basel, 1989.
- [35] C.M. Elliott and D.A. French. A nonconforming finite-element method for the two-dimensional Cahn-Hilliard equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 26(4) :884–903, 1989.
- [36] C.M. Elliott and H. Garcke. On the Cahn-Hilliard equation with degenerate mobility. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 27 :404–423, 1996.
- [37] C.M. Elliott and H. Garcke. Diffusional phase transitions in multicomponent systems with a concentration dependent mobility matrix. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 109(3-4) :242–256, 1997.
- [38] C.M. Elliott and S. Luckhaus. A generalised diffusion equation for phase separation of a multi-component mixture with interfacial free energy. IMA Preprint Series 887, 1991.
- [39] A. Ern and J.-L. Guermond. *Éléments Finis : Théorie, Applications, mise en œuvre*, volume 36 of *Mathématiques & Applications*. Springer, 2002.
- [40] D.J. Eyre. Systems of Cahn-Hilliard equations. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 53(6) :1686–1712, 1993.
- [41] D.J. Eyre. Unconditionally gradient stable time marching Cahn-Hilliard equation. In *Computational and Mathematical Models of Microstructural Evolution*, volume 529. Materials Research Society Symposium proceedings, 1998.
- [42] D.J. Eyre. An unconditionally stable one-step scheme for gradient systems, 1998. cite-seer.ist.psu.edu/eyre97unconditionally.html.
- [43] X. Feng and A. Prohl. Numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation and approximation for the Hele-Shaw problem, part I : error analysis under minimum regularities. IMA Preprint Series 1798, 2001.
- [44] X. Feng and A. Prohl. Numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation and approximation for the Hele-Shaw problem, part II : error analysis and convergence of the interface. IMA Preprint Series 1799, 2001.
- [45] M. Fortin and R. Glowinski. *Méthodes de Lagrangien Augmenté*. Dunod, Paris, 1982.
- [46] H. Garcke, B. Nestler, and B. Stoth. On anisotropic order parameter models for multi-phase systems and their sharp interface limits. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 115(1-2) :87–108, 1998.
- [47] H. Garcke, B. Nestler, and B. Stoth. A multi phase field : numerical simulations of moving phase boundaries and multiple junctions. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 60(1) :295–315, 1999.
- [48] V. Girault and P.-A. Raviart. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations. Theory and Algorithms.*, volume 5 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, 1986.

-
- [49] G.A. Greene. Experimental modeling of heat and mass transfer in a two-fluid bubbling pool with application to molten core-concrete interactions. Technical Report NUREG/CR-5875, NUREG, 1992.
- [50] G.A. Greene, J.C. Chen, and M.T. Conlin. Onset of entrainment between immiscible liquid layers due to rising gas bubbles. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(6) :1309–1317, 1988.
- [51] G.A. Greene, J.C. Chen, and M.T. Conlin. Bubble induced entrainment between stratified liquid layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34(1) :149–157, 1991.
- [52] G.A. Greene and T.F. Irvin. Heat transfer between stratified immiscible liquid layers driven by gas bubbling across the interface. In *ANS proceedings of the National Heat Transfer Conference, July 24-27, Houston, Texas*, 1988.
- [53] J.-L. Guermond and L. Quartapelle. On the approximation of the unsteady navier-stokes equations by finite element projection methods. *Numerische Mathematik*, 80 :207–238, 1998.
- [54] J.L. Guermond, P. Mineev, and J. Shen. An overview of projection methods for incompressible flows. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 2005.
- [55] H. Guillard, F. Duval, J.-C. Latché, and R. Panescu. Numerical multiphase modeling of bubbly flows. In *Fourth Conference on Applied Mathematics and Scientific Computing*, Brijuni, Croatie, 2005.
- [56] H. Guillard and R. Panescu. Multiphase modelling of bubbly flows : I. derivation of a drift flux model. Technical report, INRIA, 2006. en préparation.
- [57] M.E. Gurtin. Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a micro-force balance. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 92 :178–192, 1996.
- [58] D. Jacqmin. An energy approach to the continuum surface tension method : Application to droplet coalescence and droplet/wall interactions. In *ASME IMECE*, San Francisco, 1995.
- [59] D. Jacqmin. Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics*, 155 :96–127, 1999.
- [60] D. Jacqmin. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 402 :57–88, 2000.
- [61] D. Jamet, O. Legaigue, N. Coutris, and J.M. Delhayé. The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase-change. *Journal of Computational Physics*, 169 :624–651, 2001.
- [62] D. Jamet, D. Torres, and J.U. Brackbill. On the theory and computation of surface tension : The elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method. *Journal of Computational Physics*, 182 :262–276, 2002.
- [63] H. Ji, D. Chopp, and J.E. Dolbow. A hybrid extended finite element/level set method for modeling phase transformations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 54 :1209–1233, 2002.
- [64] M. Jobelin, C. Lapuerta, J.-C. Latché, Ph. Angot, and B. Piar. A finite element penalty-projection method for incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 217(2) :502–518, 2006.

- [65] D. Kay and R. Welford. A multigrid finite element solver for the Cahn-Hilliard equation. *Journal of Computational Physics*, 212 :288–304, 2006.
- [66] J. Kim. *Modeling and simulation of multi-component, multi-phase fluid flows*. Ph. d. thesis, Univeristy of California, Department of Mathematics 103 Multipurpose Science & Technology Bldg, Univeristy of California, Irvine, CA 92697-3875 US, 2002. Thesis advisor : Professor John Lowengrub.
- [67] J. Kim. A continuous surface tension force formulation for diffuse-interface models. *Journal of Computational Physics*, 204(2) :784–804, 2005.
- [68] J. Kim. A diffuse-interface model for axisymmetric immiscible two-phase flow. *Applied Mathematics and Computation*, 160(2) :589–606, 2005.
- [69] J. Kim, K. Kang, and J. Lowengrub. Conservative multigrid methods for ternary Cahn-Hilliard systems. *Communications in Mathematical Sciences*, 2(1) :53–77, 2004.
- [70] J. Kim and J. Lowengrub. Phase field modeling and simulation of three-phase flows. *Interfaces and free boundaries*, 7(4) :435–466, 2005.
- [71] J. Kim and J. Lowengrub. Interfaces and multicomponent fluids, 2006. A paraître dans *Encyclopedia of Mathematical Physics*.
- [72] J.L. Lions and E. Magenes. *Problèmes aux limites non homogènes et applications*, volume 1. Dunod, 1968.
- [73] C. Liu and J. Shen. A phase field model for the mixture of two incompressible fluids and its approximation by a fourier-spectral method. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 179(3-4) :211–228, 2003.
- [74] J.S. Lowengrub and L. Truskinovsky. Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions. *Proc. Royal Soc. of London, Serie A*, 454 :2617–2654, 1998.
- [75] S. Maier-Paape. The Cahn-Hilliard equation. Lecture Script SS, Universität Augsburg, 1996.
- [76] M. Meier, G. Yadigaroglu, and B.L. Smith. A novel technique for including surface tension in plic-vof methods. *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, 21 :61–73, 2002.
- [77] B. Merriman, J. Bence, and S. Osher. Motion of multiple junctions : A level set approach. *Journal of Computational Physics*, 112 :334–363, 1994.
- [78] A. Miranville and A. Piétrus. A new formulation of the Cahn-Hilliard equation. *Nonlinear Analysis : Real World Applications*, 7 :285–307, 2006.
- [79] B.T. Nadiga and S. Zaleski. Investigations of a two-phase fluid model. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 15 :885–896, 1996.
- [80] B. Nestler, D. Danilov, and P. Galenko. Crystal growth of pure substances : Phase-field simulations in comparison with analytical and experimental results. *Journal of Computational Physics*, 207(1) :221–239, 2005.
- [81] B. Nestler and A.A. Wheeler. Phase-field modeling of multi-phase solidification. *Computer Physics Communications*, 147 :230–233, 2002.

-
- [82] A. Novick-Cohen. On the viscous Cahn-Hilliard equation. In *Material instabilities in Continuum Mechanics*, pages 329–342. Oxford University Press, 1988.
 - [83] M. Ohta, T. Imura, Y. Yoshida, and M. Sussman. A computational study of the effect of initial bubble conditions on the motion of a gas bubble rising in viscous liquids. *International Journal of Multiphase Flow*, 31(2) :223–237, 2005.
 - [84] S. Osher and R. Fedkiw. *Level-Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*, volume 153 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, 2003.
 - [85] S. Osher and R.P. Fedkiw. Level set methods : An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169 :463–502, 2001.
 - [86] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79 :12–49, 1988.
 - [87] P. Papon and J. Leblond. *Thermodynamique des états de la matière*, volume 41 of *Enseignement des sciences*. Hermann, 1990.
 - [88] B. Piar. PELICANS : Un outil d’implémentation de solveurs d’équations aux dérivées partielles. Note Technique 2004/33, IRSN, 2004.
 - [89] J.S. Rowlinson and B. Widom. *Molecular Theory of Capillarity*. Clarendon Press, 1982.
 - [90] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31 :567–603, 1999.
 - [91] J.A. Sethian. *Level-Set Methods : Evolving Interfaces in Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge University Press, 1996.
 - [92] J.A. Sethian and P. Smereka. Level set methods for fluid interfaces. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 35 :341–372, 2003.
 - [93] S. Shin and D. Juric. Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics*, 180 :427–470, 2002.
 - [94] K.A. Smith, F.J. Solis, and D.L. Chopp. A projection method for motion of triple junctions by level sets. *Interfaces and Free Boundaries*, 4(3) :239–261, 2002.
 - [95] A. Smolianski. Finite-element/level-set/operator-splitting (felsos) approach for computing two-fluid unsteady flows with free moving interfaces. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 48(3) :231–269, 2005.
 - [96] M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, and S. Osher. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computer & Fluids*, 27(5-6) :663–680, 1998.
 - [97] M. Sussman and E.G. Puckett. A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :301–337, 2000.
 - [98] M. Sussman and P. Smereka. Axisymmetric free boundary problems. *Journal of Fluid Mechanics*, 341 :269–294, 1997.

- [99] R. Temam. *Infinite-dimensional dynamical systems in mechanics and physics*, volume 68 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, second edition, 1997.
- [100] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.-J. Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169 :708–759, 2001.
- [101] S.O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100 :25–37, 1992.
- [102] J.-P. Van Dorsselaere, P. Giordano, M. Kissane, T. Montanelli, B. Schwinges, S. Ganju, and L. Dikson. The european source-term evaluation code astec : status and applications, including candu plant applications. In *Sixth International Conference on Simulation Methods in Nuclear Engineering*, Canada, 2004.
- [103] L.A. Vese and T.F. Chan. A multiphase level set framework for image segmentation using the mumford and shah model. *International Journal of Computer Vision*, 50(3) :271–293, 2002.
- [104] J.K. Walters and J.F. Davidson. The initial motion of a gas bubble formed in an inviscid liquid. part 2. the three-dimensional bubble and the toroidal bubble. *Journal of Fluid Mechanics*, 17 :321–336, 1963.
- [105] S. Whitaker. Interfacial phenomena. In *Handbook of Multiphase Systems*, chapter 1.4, pages 1–224 – 1–246. Hetsroni, Gad, 1982.
- [106] B.D. Wood, M. Quintard, and S. Whitaker. Jump conditions at non-uniform boundaries : the catalytic surface. *Chemical Engineering Science*, 55(22) :5231–5245, 2000.
- [107] P. Yue, J. Feng, C. Liu, and J. Shen. A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 515 :293–317, 2004.
- [108] H.-K. Zhao, T. Chan, B. Merriman, and S. Osher. A variational level set approach to multiphase motion. *Journal of Computational Physics*, 127(1) :179–195, 1996.

Echanges de masse et de chaleur entre deux phases liquides stratifiées dans un écoulement à bulles

Résumé : Lors d'un hypothétique accident majeur dans un réacteur à eau sous pression, la dégradation du cœur peut produire un bain stratifié, traversé par un flux de bulles. Ce dernier influence grandement les transferts thermiques, dont l'intensité est déterminante dans le déroulement de l'accident. Dans ce contexte, ce travail porte sur une modélisation de type interface diffuse pour l'étude d'écoulements incompressibles, anisothermes, composés de trois constituants non miscibles, sans changement de phase. Dans les méthodes à interface diffuse, l'évolution du système est décrite à travers la minimisation d'une énergie libre. L'originalité de notre approche, inspirée du modèle de Cahn-Hilliard, réside dans la forme particulière de l'énergie que nous proposons, qui permet d'avoir un modèle *algébriquement* et *dynamiquement consistant*, au sens suivant : d'une part, l'énergie libre triphasique coïncide exactement avec celle du modèle de Cahn-Hilliard diphasique quand seulement deux des phases sont présentes ; d'autre part, si une phase est initialement absente alors elle n'apparaîtra pas au cours du temps, cette dernière propriété étant stable vis à vis des erreurs numériques. L'existence et l'unicité des solutions faibles et fortes sont démontrées en dimension 2 et 3 ainsi qu'un résultat de stabilité pour les états métastables.

La modélisation d'un système ternaire en écoulement anisotherme est ensuite poursuivie par couplage des équations de Cahn-Hilliard avec celles du bilan d'énergie et de Navier-Stokes où les contraintes surfaciques sont prises en compte à travers des forces volumiques capillaires. L'ensemble est discrétisé en temps et en espace de façon à préserver les propriétés du problème continu (conservation du volume, estimation d'énergie). Différents résultats numériques sont présentés, depuis le cas de validation de l'étalement d'une lentille entre deux phases jusqu'à l'étude des transferts de masse et de chaleur à travers une interface liquide/liquide traversée par une bulle ou un train de bulles.

Heat and mass transfers between two stratified liquid phases in a bubbly flow

Abstract : During an hypothetical major accident in a pressurized water reactor, the deterioration of the core can produce a stratified pool crossed by a bubbly flow. This latter strongly impacts the heat transfers, whose intensities are crucial in the progression of the accident. In this context, this work is devoted to the diffuse interface modelling for the study of anisotherm incompressible flows, composed of three immiscible components, with no phase change. In the diffuse interface methods, the system evolution is driven by the minimisation of a free energy. The originality of our approach, derived from the Cahn-Hilliard model, is based on the particular form of the energy we proposed, which enables to have an *algebraically* and *dynamically consistent* model, in the following sense : on the one hand, the triphasic free energy is equal to the diphasic one when only two phases are present ; on the other, if a phase is not initially present then it will not appear during system evolution, this last property being stable with respect to numerical errors. The existence and the uniqueness of weak and strong solutions are proved in two and three dimensions as well as a stability result for metastable states.

The modelling of an anisotherm three phase flow is further accomplished by coupling the Cahn-Hilliard equations with the energy balance and Navier-Stokes equations where surface tensions are taken into account through volumic capillary forces. These equations are discretized in time and space in order to preserve properties of continuous model (volume conservation, energy estimate). Different numerical results are given, from the validation case of the lens spreading between two phases, to the study of the heat and mass transfers through a liquid/liquid interface crossed by a single bubble or a series of bubbles.

Mots-clefs : Simulation numérique directe, modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes, écoulement triphasique, interface liquide/liquide, bulles, entraînement, interaction corium-béton.

Discipline - Spécialité doctorale : Mathématiques Appliquées.

Adresse des laboratoires : IRSN/DPAM/SEMIC/LIMSI, BP 3, 13115 St-Paul-Lez-Durance,
LATP, 39 rue F. Joliot Curie, 13453 Marseille cedex 13.